



# Modélisation des propriétés opto-électroniques des superréseaux de type III InAs/GaSb

Julien Imbert

## ► To cite this version:

Julien Imbert. Modélisation des propriétés opto-électroniques des superréseaux de type III InAs/GaSb. Optique / photonique. Université Paris Diderot Paris VII, 2015. Français. NNT : . tel-01309295

**HAL Id: tel-01309295**

**<https://hal.science/tel-01309295>**

Submitted on 9 May 2016

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

# Modélisation des propriétés opto-électroniques des superréseaux de type III InAs/GaSb

*Modeling of opto-electronical properties of type III InAs/GaSb superlattices*

THÈSE dirigée par Virginie TRINITE et Philippe CHRISTOL

Soutenue le 27 novembre 2015 pour l'obtention du

**Doctorat de l'UNIVERSITE PARIS DIDEROT (Paris 7) SORBONNE  
PARIS CITE**

**Spécialité : Physique**

par Julien IMBERT

## Composition du jury :

M. Philippe CHRISTOL	IES	<i>Co-Directeur de thèse</i>
Mme Sophie DERELLE	ONERA	<i>Encadrante</i>
M. Jean-Marc JANCU	INSA Rennes	<i>Rapporteur</i>
M. François JULIEN	IEF	<i>Rapporteur</i>
M. Giuseppe LEO	MPQ	<i>Président</i>
M. Jean-Christophe PEYRARD	DGA	<i>Examineur</i>
Mme Virginie TRINITE	Thalès 3-5 Lab	<i>Directeur de thèse</i>



## REMERCIEMENTS

---

Maintenant que je suis docteur, il est grand temps d'adresser mes remerciements à tous ceux qui m'ont aidé à parvenir jusqu'ici.

Je remercie, dans un premier temps, chacun des membres du jury de leur présence à ma soutenance pour juger de la qualité de mon travail. Un remerciement tout d'abord à mes deux rapporteurs, M. François JULIEN et M. Jean-Marc JANCU qui ont réalisé un travail précis et de qualité et ceci dans des délais très serrés. Je remercie également M. Giuseppe LEO, président de ce jury et enfin la DGA, représentée par M. Jean-Christophe PEYRARD et M. Philippe ADAM, qui a financé ces travaux.

Je remercie mes encadrants officiels : Philippe pour ton soutien, tes remontrances quand j'en avais besoin et ces réunions SR qui ont ponctué et guidé toute ma thèse ; Sophie pour ton énergie, tes solutions pour tous les problèmes que l'on a pu rencontrer, qu'ils viennent de moi ou de la thèse ; Virginie pour tes connaissances en physique et pour m'avoir permis de devenir un véritable programmeur.

Je remercie également mes encadrants officieux : Borge VINTER qui est à l'origine de tous mes codes et avec qui les discussions m'ont permises de prendre un recul nécessaire sur mon travail, Julien JAECK pour tes revues à distance de mon code et tes analyses pertinentes de mes résultats. Tu l'as eu, Julien, ton pot au whisky ! Enfin, merci à Riad HAIDAR qui a encadré cette thèse de "loin" mais a été important à sa réussite.

Ensuite, c'est beaucoup de doctorants que j'ai à remercier. En premier les doctorants SR, Edouard et Marie!!! Tous les doctorants de l'Onera, que ce soit du D1 ou du J3, avec nos afterworks au Miibar. Puis, toutes les personnes que j'ai pu côtoyer au III-VLab : Maxime, Antoine, Gaël, Joseph, Peppino, Gwenaëlle... J'en oublie sûrement malheureusement plein. Enfin, les gars de l'InSb de Montpellier : Axel et Johan.

Je tiens aussi à remercier tous mes amis de l'IOGS (docteur ou pas;) ), ceux rencontrés avant la thèse ou pendant pour leur soutien, les discussions passionnantes et bien sûr les sorties entre amis.

Enfin, mes derniers remerciements vont à ma famille et tout particulièrement à mes parents et ma sœur.





## TABLE DES MATIÈRES

1	ÉTAT DE L'ART DES DÉTECTEURS SR INAS/GASB ET DE LEURS MÉTHODES DE MODÉLISATION	5
1.1	Contexte de la détection infrarouge	5
1.1.1	Le rayonnement infrarouge	5
1.1.2	Détecteurs infrarouge quantiques et enjeux actuels	7
1.2	La structure quantique à superréseau	8
1.2.1	Le superréseau	8
1.2.2	Intérêt du superréseau InAs/GaSb pour la détection infrarouge	12
1.2.3	Etat de l'art des détecteurs à base de superréseaux InAs/GaSb	15
1.3	Etat de l'art de la modélisation	21
1.3.1	Considérations théoriques générales	21
1.3.2	La méthode tight-binding	23
1.3.3	La méthode des pseudopotentiels empiriques	25
1.3.4	La méthode <b>kp</b> avec approximation de la fonction enveloppe	28
1.3.5	Au delà de la méthode kp standard	32
1.3.6	Conclusion sur l'état de l'art	36
1.4	Conclusion et objectifs de la thèse	37
2	MODÉLISATION DES PROPRIÉTÉS OPTIQUES DES SUPERRÉSEAUX INAS/GASB	39
2.1	Présentation des structures étudiées	39
2.1.1	Le recouvrement des fonctions d'onde	40
2.1.2	Densité d'états du Superréseau	43
2.2	Modélisation de la structure de bande et des fonctions d'onde	44
2.2.1	Présentation du calcul	44
2.2.2	Influence de la structure de la période	48
2.2.3	Influence des paramètres matériaux	50
2.2.4	Influence de la température	54
2.3	Comparaison entre expérience et modèle pour les énergies de bande interdites	56
2.3.1	Mesures des gaps par photoluminescence	56
2.3.2	Précision des points de mesures	57
2.3.3	Choix des paramètres matériaux	58
2.4	Modélisation du coefficient d'absorption	62
2.4.1	Le calcul de l'absorption	62
2.4.2	L'élargissement des bandes	65
2.5	Comparaison entre expérience et modèle pour l'absorption	65
2.5.1	Mesure du coefficient d'absorption à 80K	65
2.5.2	Comparaison avec l'expérience et choix des paramètres d'élargissement de bande	70

2.5.3	Résultats sur l'absorption	74
2.6	Conclusion	82
3	MODÉLISATION DES PROPRIÉTÉS INTRINSÈQUES DU SUPERRÉSEAU IN- AS/GASB POUR LA DÉTECTION IR	85
3.1	Modélisation de la concentration intrinsèque des porteurs libres	85
3.1.1	Calcul de la densité d'états	86
3.1.2	Densité d'état des structures étudiées	87
3.1.3	Concentration intrinsèque de porteurs libres	88
3.2	Modélisation de la masse effective	89
3.2.1	Calcul de la masse effective	90
3.2.2	Masse effective des électrons dans les superréseaux	90
3.2.3	Masse effective des trous dans les superréseaux	94
3.3	Absorption sous champ	100
3.3.1	Présentation d'une structure sous champ et des problèmes de modélisation associés	100
3.3.2	Solution pour la modélisation d'une structure sous champ	102
3.3.3	Résultats pour l'absorption sous champ	105
3.4	Proposition d'une structure superréseau pour le LWIR à 80K	108
3.5	Conclusion	113
A	PRINCIPE DE FONCTIONNEMENT D'UNE PHOTODIODE	119
A.1	Jonction PIN	119
A.2	Structures à barrière	119
A.2.1	Structure nBn	120
A.2.2	Structure M	120
A.2.3	Structure CBIRD	121
B	MATRICE $\mathbf{k_p}$	123
C	COMPLÉMENTS AU CALCUL DE L'ABSORPTION	129

## TABLE DES FIGURES

FIGURE 1.1	Luminance spectrale d'un corps noir à plusieurs températures. 6
FIGURE 1.2	Transmission de l'atmosphère en fonction de la longueur d'onde. 6
FIGURE 1.3	Représentation schématique d'une structure quantique à superréseau. 9
FIGURE 1.4	Représentation schématique des différents types d'alignement possibles pour une structure quantique à SR. 9
FIGURE 1.5	Représentation schématique des interfaces entre les matériaux d'un période pour un SR-SAC (a) et pour un SR-AC (b) 10
FIGURE 1.6	Niveaux d'énergies et fonctions d'onde dans un puits quantique unique (a), deux puits quantiques (b), 10 puits quantiques formant une structure superréseau (c). Ici sont représentées uniquement les deux premières minibandes pour la bande de conduction. Figure issue de [Cervera, 2011] 11
FIGURE 1.7	Évolution de la longueur d'onde de coupure (en orange) et du recouvrement des fonctions d'onde (en vert) en fonction de l'épaisseur de la demi période pour un superréseau In-As/GaSb symétrique opérant à 80K. Figure issue de [Cervera, 2011]. 12
FIGURE 1.8	Schéma présentant les principaux phénomènes de recombinaison Auger : a) Auger 1 b) Auger 7. 14
FIGURE 1.9	$R_0A$ en fonction de la longueur d'onde de coupure pour différents détecteurs à superréseau, comparés à l'état de l'art du MCT en 2011 [Razeghi <i>et al.</i> , 2011]. L'équipe CQD est indiqué par NU et présente des résultats de détecteurs SR avec une structure pin (NU (Binary-SL)) et une structure M (NEW - NU (M-SL)). 19
FIGURE 1.10	Comparaison des pseudopotentiels des méthodes AEPM et SEPM. (a) Potentiel atomique du matériau puits (A) et du matériau barrière (B). (b) pseudopotentiel d'un SR avec l'EPM atomistique. (c) pseudopotentiel d'un SR avec la SEPM. Figure issue de [Dente <i>et al.</i> , 2002] 28
FIGURE 1.11	Schéma des structures de bandes des matériaux d'un SR AlAs/GaAs, ainsi que les interactions entre les bandes des deux matériaux 31
FIGURE 1.12	Schéma des structures de bandes des matériaux d'un SR In-As/GaSb, ainsi que les interactions entre les bandes des deux matériaux 32

- FIGURE 1.13 Schéma du potentiel du SR  $\text{InAs}_{0.91}\text{Sb}_{0.09}/\text{GaSb}$  avec des interfaces progressives. Figure issue de [Hong *et al.*, 2009] 33
- FIGURE 1.14 Schéma des structures de bandes des matériaux d'un SR In-As/GaSb, ainsi que les interactions entre les bandes des deux matériaux 38
- FIGURE 2.1 Représentation schématique des trois structures SR étudiées (de haut en bas) : GaSb-rich (10MC d'InAs/19MC de GaSb,  $R = 0,526$ ), symétrique (10MC d'InAs/10MC de GaSb,  $R = 1$ ) et InAs-rich (7MC d'InAs/4MC de GaSb,  $R = 1,75$ ). 40
- FIGURE 2.2 Première minibande de conduction ( $E_1$ , en bleu) et première minibande de valence (trous lourds  $\text{HH}_1$ , en vert) d'un SR InAs-rich (7MC InAs / 4MC GaSb) dans le MWIR et probabilité de présence des niveaux d'énergies fondamentaux en  $k = 0$ , calculés avec mon code. 41
- FIGURE 2.3 Première minibande de conduction ( $E_1$ , en bleu) et premier niveau discret de valence (trous lourds  $\text{HH}_1$ , en vert) d'un SR GaSb-rich (10MC InAs / 19MC GaSb) dans le MWIR et probabilité de présence des niveaux d'énergies fondamentaux. 42
- FIGURE 2.4 Première minibande de conduction ( $E_1$ , en bleu) et première minibande de valence (trous lourds  $\text{HH}_1$ , en vert) d'un SR symétrique (10MC InAs / 10MC GaSb) dans le MWIR et probabilité de présence des niveaux d'énergies fondamentaux. 42
- FIGURE 2.5 Représentation schématique de la densité d'états pour un superréseau et comparaison avec celles d'un puits quantique (2D) et d'un matériau massif (3D). 44
- FIGURE 2.6 Structures de bande des SR : a) InAs-rich (7 MC d'InAs / 4 MC de GaSb) b) symétrique (10 MC d'InAs / 10 MC de GaSb) c) GaSb-rich (10 MC d'InAs / 19 MC de GaSb) calculées à l'aide de la méthode  $k_p$  dans les directions  $[1,0,0]$  (valeurs positives de  $\vec{k}$ ) et  $[0,0,1]$  (valeurs négatives de  $\vec{k}$ ), i.e. la direction de croissance du SR. 47
- FIGURE 2.7 Potentiel d'un SR symétrique (10 MC d'InAs/10 MC de GaSb) avec prise en compte de l'InSb aux interfaces. En noir sont représentées les bandes de conduction des matériaux et en rouge les bandes de valence. 49
- FIGURE 2.8 Énergies de bande interdite calculées en fonction de l'épaisseur de la période pour les trois types de SR InAs-rich (7 MC d'InAs / 4 MC de GaSb) (rouge), symétrique (10 MC d'InAs / 10 MC de GaSb) (vert) et GaSb-rich (10 MC d'InAs / 19 MC de GaSb) (bleu). Les traits pleins correspondent aux calculs pour lesquels l'InSb a été pris en compte dans la structure, les traits pointillés aux calculs où il n'a pas été intégré. 49

- FIGURE 2.9 Énergie de bande interdite en fonction de l'épaisseur de la période pour les trois types de SR InAs-rich (7 MC d'InAs / 4 MC de GaSb) (rouge), symétrique (10 MC d'InAs / 10 MC de GaSb) (vert) et GaSb-rich (10 MC d'InAs / 19 MC de GaSb) (bleu). Les traits pleins correspondent aux calculs faits avec la valeur maximale du bandoffset InAs/GaSb (575 meV) et les traits pointillés à ceux faits avec la valeur minimale du bandoffset InAs/GaSb (525 meV). 51
- FIGURE 2.10 Énergie de bande interdite en fonction de l'épaisseur de la période pour les trois types SR InAs-rich (7 MC d'InAs / 4 MC de GaSb) (rouge), symétrique (10 MC d'InAs / 10 MC de GaSb) (vert) et GaSb-rich (10 MC d'InAs / 19 MC de GaSb) (bleu). Les traits pleins correspondent aux calculs faits avec la valeur maximale du bandoffset InSb/GaSb (160 meV) et les traits pointillés à ceux faits avec la valeur minimale du bandoffset InSb/GaSb (-80 meV). 52
- FIGURE 2.11 Énergie de bande interdite en fonction de l'épaisseur de la période pour les trois types de SR InAs-rich (7 MC d'InAs / 4 MC de GaSb) (rouge), symétrique (10 MC d'InAs / 10 MC de GaSb) (vert) et GaSb-rich (10 MC d'InAs / 19 MC de GaSb) (bleu). Les traits pleins correspondent aux calculs faits avec la valeur maximale du potentiel de déformation des bandes de conduction  $a_c$  de l'InAs (-5,08 eV) et les traits pointillés à ceux faits avec la valeur minimale de  $a_c$  (-11,7 eV). 53
- FIGURE 2.12 Énergie de bande interdite en fonction de l'épaisseur de la période pour les trois types de SR InAs-rich (7 MC d'InAs / 4 MC de GaSb) (rouge), symétrique (10 MC d'InAs / 10 MC de GaSb) (vert) et GaSb-rich (10 MC d'InAs / 19 MC de GaSb) (bleu). Les traits pleins correspondent aux calculs faits avec la valeur maximale du potentiel de déformation  $b$  de l'InAs (-2.57 eV) et les traits pointillés à ceux faits avec la valeur minimale de  $b$  (-8 eV). 54
- FIGURE 2.13 Énergie de bande interdite en fonction de la température pour les trois types de SR (a) InAs-rich 7/4 (rouge), (b) symétrique 10/10 (vert) et (c) GaSb-rich 10/19 (bleu). La valeur de  $\beta$  est fixée à la valeur conseillée par Vurgaftman de 140 K. Les traits pleins correspondent aux calculs faits avec la valeur maximale du paramètre de Varshni  $\alpha$  du GaSb (453 meV/K) et les traits pointillés à ceux faits avec la valeur minimale de  $\alpha$  (108 meV/K). 55

- FIGURE 2.14 Énergie de bande interdite en fonction de la température pour les trois types de SR (a) InAs-rich 7/4 (rouge), (b) symétrique 10/10 (vert) et (c) GaSb-rich 10/19 (bleu). La valeur de  $\alpha$  est fixée à la valeur conseillée par Vurgaftman de 417 meV/K. Les traits pleins correspondent aux calculs faits avec la valeur maximale du paramètre de Varshni  $\beta$  du GaSb (186 K) et les traits pointillés à ceux faits avec la valeur minimale de  $\beta$  (-10 K). 56
- FIGURE 2.15 Spectres de photoluminescence mesurés au FTIR à 80K pour les trois structures GaSb-rich, symétrique et InAs-rich. Figure issue de [Taalat, 2013] 57
- FIGURE 2.16 Spectre de diffraction X montrant le SR accordé sur le substrat pour les trois structures SR étudiées. 58
- FIGURE 2.17 Énergie de bande interdite calculée (traits pleins) et mesurée (points) à 80K fonction de l'épaisseur des SR InAs-rich (rouge), symétrique (vert) et GaSb-rich(bleu). Les traits pointillés sont les valeurs extrêmes du calcul dans le cas d'une erreur de plus ou moins une MC sur l'épaisseur de la période de l'échantillon. 60
- FIGURE 2.18 Énergie de bande interdite calculée (rouge) et mesurée (noir) fonction de la température d'un SR GaSb-rich (9,5 MC d'InAs/22,5 MC de GaSb). 60
- FIGURE 2.19 Énergie de bande interdite théorique en fonction de la température pour les trois structures étudiées et pour un SR symétrique (7 MC d'InAs / 7 MC de GaSb). 61
- FIGURE 2.20 a) Énergies de bande interdite mesurées en fonction de la température pour les trois structures étudiées b) Énergies de bande interdite mesurées en fonction de la température pour différents SR symétriques (figures issues de [Taalat, 2013]). 62
- FIGURE 2.21 Photographie du banc de mesure pour déterminer le spectre d'absorption à différentes températures des échantillons SR. 66
- FIGURE 2.22 Représentation schématique de la méthode expérimentale de la mesure de transmission du SR et photographie du porte échantillon développé à cet effet, avec les deux types de structures. 67
- FIGURE 2.23 spectres de transmission à 300K de substrats de GaSb pour différents dopages. Figure issue de [Rodriguez, 2005] 68
- FIGURE 2.24 Spectres de transmission du substrat de GaSb référent et d'un SR GaSb-rich (9,5 MC d'InAs / 22,5 MC de GaSb) sur son substrat GaSb. 68
- FIGURE 2.25 Spectres de transmission à 80K d'un échantillon de SR GaSb-rich (9,5 MC d'InAs / 22,5 MC de GaSb) sur son substrat GaSb dopé n (en rouge) et du substrat seul (en noir). 69

- FIGURE 2.26 Spectre de transmission à 80K d'un SR GaSb-rich (9,5 MC d'InAs / 22,5 MC de GaSb). 69
- FIGURE 2.27 Coefficient d'absorption à 80K d'un SR GaSb-rich (9,5 MC d'InAs / 22,5 MC de GaSb). 70
- FIGURE 2.28 Schéma du champ incident sur un structure SR. a) La direction de propagation est dans la direction  $[0,0,1]$ , la polarisation est orientée lors du calcul dans la direction  $[1,0,0]$ . b) La direction de propagation est dans la direction  $[1,0,0]$ , la polarisation est orientée dans la direction  $[0,0,1]$ . 71
- FIGURE 2.29 Coefficient d'absorption à 80K d'un échantillon GaSb-rich (9,5 MC d'InAs / 22,5 MC de GaSb) calculé (en noir) et mesuré (en rouge) pour une polarisation  $[1,0,0]$ . Sont aussi représentées les contributions des différentes transitions entre la première bande de conduction et les différentes bandes de valence. 72
- FIGURE 2.30 Structure de bande d'un SR GaSb-rich (9,5 MC d'InAs / 22,5 MC de GaSb), dans les directions  $[1,0,0]$  (valeurs positives de  $\vec{k}$ ) et  $[0,0,1]$  (valeurs négatives de  $\vec{k}$ ), i.e. la direction de croissance du SR. 73
- FIGURE 2.31 Spectre d'absorption calculé à une température de 80K pour un SR InAs-rich (rouge), symétrique (vert) et GaSb-rich (bleu) pour une polarisation dans la direction  $[1,0,0]$ , c'est-à-dire une propagation de l'onde le long de l'axe de croissance. 75
- FIGURE 2.32 Coefficient d'absorption calculé pour une polarisation dans la direction  $[1,0,0]$  (trait pointillé) et réponse spectrale mesurée (trait plein) en fonction de la longueur d'onde à 77K pour un SR symétrique 10/10 (vert) et un SR GaSb-rich 10/19 (bleu). 75
- FIGURE 2.33 Coefficient d'absorption à 80K d'un échantillon symétrique (10 MC d'InAs / 10 MC de GaSb) calculé pour une polarisation  $[1,0,0]$ . Sont aussi représentées les contributions des différentes transitions entre la première bande de conduction et les différentes bandes de valence. 76
- FIGURE 2.34 Coefficient d'absorption à 80K d'un échantillon InAs-rich (7 MC d'InAs / 4 MC de GaSb) calculé pour une polarisation  $[1,0,0]$ . Sont aussi représentées les contributions des différentes transitions entre la première bande de conduction et les différentes bandes de valence. 77
- FIGURE 2.35 Coefficient d'absorption calculé à une température de 80K pour un SR InAs-rich (7 MC d'InAs / 4 MC de GaSb en rouge), symétrique (10 MC d'InAs / 10 MC de GaSb en vert) et GaSb-rich (10 MC d'InAs / 19 MC de GaSb en bleu) pour une polarisation de l'onde incidente orientée dans la direction  $[0,0,1]$  (trait plein) et  $[1,0,0]$  (trait pointillé). 77



- FIGURE 2.36 Coefficient d'absorption à 80K d'un échantillon symétrique (10 MC d'InAs / 10 MC de GaSb) calculé pour une polarisation  $[0, 0, 1]$ . Sont aussi représentées les contributions des différentes transitions entre la première bande de conduction et les différentes bandes de valence. 78
- FIGURE 2.37 Coefficient d'absorption à 80K d'un échantillon GaSb-rich (10 MC d'InAs / 19 MC de GaSb) calculé pour une polarisation  $[0, 0, 1]$ . Sont aussi représentées les contributions des différentes transitions entre la première bande de conduction et les différentes bandes de valence. 79
- FIGURE 2.38 Coefficient d'absorption à 80K d'un échantillon InAs-rich (7 MC d'InAs / 4 MC de GaSb) calculé pour une polarisation  $[0, 0, 1]$ . Sont aussi représentées les contributions des différentes transitions entre la première bande de conduction et les différentes bandes de valence. 79
- FIGURE 2.39 Coefficient d'absorption à 80K d'un échantillon GaSb-rich (8,6 MC d'InAs / 13,5 MC de GaSb) mesuré par SCD (points rouges) et calculé par mon modèle (trait plein noir) pour une polarisation  $[1, 0, 0]$ . 80
- FIGURE 3.1 Structure de bande d'un SR GaSb-rich (10 MC d'InAs / 19 MC de GaSb) représentant le calcul de la densité d'états à partir d'une structure de bande calculée. Pour une énergie  $E$  donnée, on somme la contribution de toutes les énergies de la structure de bande égale à  $E$ . 86
- FIGURE 3.2 Densité d'états théorique en fonction de l'énergie pour les bandes de conduction à 77K pour les trois structures SR étudiées : SR InAs-rich (7 MC d'InAs / 4 MC de GaSb) en rouge, SR symétrique (10 MC d'InAs / 10 MC de GaSb) en vert et SR GaSb-rich (10 MC d'InAs / 19 MC de GaSb) en bleue. 87
- FIGURE 3.3 Densité d'états théorique en fonction de l'énergie pour les bandes de valence à 77K pour les trois structures SR étudiées : SR InAs-rich (7 MC d'InAs / 4 MC de GaSb) en rouge, SR symétrique (10 MC d'InAs / 10 MC de GaSb) en vert et SR GaSb-rich (10 MC d'InAs / 19 MC de GaSb) en bleue. 88
- FIGURE 3.4 Concentration intrinsèque de porteurs libres à 80K en fonction du nombre de MC d'InAs sur l'axe des abscisses et de GaSb sur l'axe des ordonnées. 90
- FIGURE 3.5 Masse effective des électrons calculée dans la direction de croissance en fonction de l'énergie de bande interdite du SR à 80K, avec les limites vers lesquels tendent les courbes. La droite en bleue présente la masse effective des électrons dans le MCT en fonction de l'énergie de bande interdite [Hansen et Schmit, 1983]. 91
- FIGURE 3.6 Masse effective des électrons calculée dans la direction de croissance en fonction de l'énergie de bande interdite du SR à 80K, figure issue de [Nguyen, 2010]. 92

- FIGURE 3.7 Masse effective des électrons calculée dans la direction perpendiculaire à la direction de croissance en fonction de l'énergie de bande interdite du SR. 93
- FIGURE 3.8 Masse effective des trous lourds calculée dans la direction de croissance en fonction de l'énergie de bande interdite du SR à 80K. 95
- FIGURE 3.9 Rendement quantique en fonction de la longueur d'onde à 77K pour les trois structures étudiées avec une zone d'absorption de 1  $\mu\text{m}$  : InAs-rich (rouge), symétrique (noir) et GaSb-rich (bleu). Figure issue de [Giard, 2015] 96
- FIGURE 3.10 Schéma de fonctionnement d'une photodiode pin idéale lors de la collecte des porteurs. 97
- FIGURE 3.11 Schéma de fonctionnement d'une photodiode  $\text{pn}^- \text{n}$  réelle lors de la collecte des porteurs. 97
- FIGURE 3.12 Rendement quantique fonction de la longueur d'onde pour une structure InAs-rich non dopé (vert) et dopé p (violet) à 77K avec une zone d'absorption de 4  $\mu\text{m}$ . 98
- FIGURE 3.13 Masse effective des trous lourds calculée dans la direction perpendiculaire à la direction de croissance en fonction de l'énergie de bande interdite du SR. 99
- FIGURE 3.14 Potentiel de la structure SR : (a) sans champ électrique, (b) avec un champ électrique. 100
- FIGURE 3.15 Schéma représentant les trois premières fonctions de Bloch de notre base. 101
- FIGURE 3.16 Représentation schématique du potentiel modélisé par notre calcul. 102
- FIGURE 3.17 Fonction d'onde de la première bande d'électrons (bleue) et de trous (vert) sous champ pour a) un SR GaSb-rich (10 MC d'InAs / 19 MC de GaSb) b) un SR InAs-rich (7 MC d'InAs / 4 MC de GaSb) avec de l'InSb dans la période permettant de compenser les contraintes. Je représente aussi le potentiel de la période simulée avec en noir le niveau des bandes de conduction des matériaux dans la période et en rouge le niveau des bandes de valence des matériaux dans la période. 103
- FIGURE 3.18 Schéma représentant les trois premières fonctions de Wannier. 104
- FIGURE 3.19 Représentation schématique de la méthode de calcul de la structure sous champ. a) Potentiel réel. b) en bleu potentiel réel et en rouge potentiel calculé avec un pas de 2 points par matériau. c) en bleu potentiel réel et en rouge potentiel calculé avec un pas de 4 points par matériau. 104
- FIGURE 3.20 Réponse spectrale mesurée à 80K pour une structure GaSb-rich (9,5 MC d'InAs / 21,5 MC de GaSb) en fonction de la longueur d'onde à différentes tensions de polarisation de 0 à -4 V. 105

FIGURE 3.21	Coefficient d'absorption calculé à 80K d'une structure GaSb-rich (9,5 MC d'InAs / 21,5 MC de GaSb) en fonction de la longueur d'onde à différentes tensions de polarisation de 0 à -4 V. <a href="#">106</a>
FIGURE 3.22	Schéma des transitions dans la structure SR sous champ à l'origine des oscillations Wannier Stark. <a href="#">106</a>
FIGURE 3.23	Énergie de bande interdite du SR en fonction de l'épaisseur d'InAs et de GaSb dans la période à 80K. <a href="#">108</a>
FIGURE 3.24	Recouvrement des fonctions d'onde (en %) de la première bande d'électron et de la première bande de trou en fonction de l'épaisseur d'InAs et de GaSb dans la période à 80K. <a href="#">110</a>
FIGURE 3.25	Coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde pour une structure SR InAs/GaSb (12 MC d'InAs / 7 MC de GaSb) à 80K calculé pour une polarisation [1,0,0]. Sont aussi représentées les contributions des différentes transitions entre la première bande de conduction et les différentes bandes de valence. <a href="#">110</a>
FIGURE 3.26	Coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde pour une structure SR InAs/GaSb (15 MC d'InAs / 11 MC de GaSb) à 80K calculé pour une polarisation [1,0,0]. Sont aussi représentées les contributions des différentes transitions entre la première bande de conduction et les différentes bandes de valence. <a href="#">111</a>
FIGURE A.1	Représentation schématique d'une jonction PIN avec son diagramme de bande associée. <a href="#">119</a>
FIGURE A.2	Schéma du diagramme de bande d'une structure nBn. <a href="#">120</a>
FIGURE A.3	a) Schéma du diagramme de bande d'une structure pMp. b) Empilement de la croissance pMp. <a href="#">121</a>
FIGURE A.4	Schéma du diagramme de bande d'une structure CBIRD. <a href="#">121</a>

## LISTE DES TABLEAUX

---

TABLE 1.1	Résumé de l'état de l'art MWIR pour les SR InAs/-GaSb. 17
TABLE 1.2	Résumé de l'état de l'art LWIR pour les SR InAs/GaSb. 18
TABLE 1.3	Résumé de l'état de l'art VLWIR pour les SR InAs/-GaSb. 19
TABLE 1.4	Résumé des avantages et inconvénients des différentes méthodes de la littérature utilisées pour la modélisation des SR InAs/GaSb 36
TABLE 2.1	Paramètres matériaux utilisés dans la modélisation <b>kp</b> dont la valeur expérimentale est mal connue 50
TABLE 2.2	Niveaux d'énergie des différentes bande de valence et de conduction, éléments de matrice et potentiel de déformation utilisés dans le code kp 18 bandes 53
TABLE 2.3	Paramètre de maille et paramètre de sa dépendance en fonction de la température des matériaux de la période du SR. 54
TABLE 2.4	Énergie de bande interdite à 0K et paramètres de Varshni des matériaux de la période du SR. 55
TABLE 3.1	Masse effective des trois structures étudiées à 80K. 94
TABLE 3.2	Masse effective des électrons mesurée (donnée de la littérature) et calculée par mon modèle. 94
TABLE 3.3	Comparaison des longueurs d'onde de coupure à 80K de SR InAs/GaSb dans le LWIR et le VLWIR entre mon modèle et la littérature. 113



## INTRODUCTION

---

Les besoins de la défense en imageur pour la vision nocturne ou détection de sources thermiques ont contribué au financement de travaux de recherche fondamentale et au développement industriel de détecteurs infrarouge (IR). Le développement s'est fait par la recherche de nouveaux matériaux et de nouvelles structures dans le but d'obtenir des détecteurs plus performants pour la détection, mais aussi pour répondre à des besoins d'utilisation sur le terrain tels que la réduction de l'encombrement ou une faible consommation électrique.

Il existe deux grandes familles de détecteurs : les détecteurs quantiques, constitués de matériaux semiconducteurs qui créent une paire électron-trou par absorption d'un photon, et les détecteurs thermiques, qui s'échauffent lors de l'exposition à un rayonnement.

L'avantage des détecteurs thermiques, également appelés détecteurs non refroidis, vient de leur utilisation à température ambiante, ce qui permet une production bas coût. Cependant, ces détecteurs sont limités par des performances moindres en terme de sensibilité et de temps de réponse comparés aux détecteurs quantiques fonctionnant généralement à des températures cryogéniques. Ces détecteurs IR refroidis et non-refroidis sont aujourd'hui à maturité technologique et industrialisés, démocratisant leur utilisation dans des domaines autres que militaire (télécommunication, astronomie, contrôle industriel, etc). Cependant, tous les besoins ne sont pas encore couverts.

Les grands axes de recherche et de développement actuels des détecteurs IR sont :

- L'amélioration des performances intrinsèques du système de détection, c'est-à-dire de leur sensibilité ou de leur temps de réponse.
- L'augmentation de la température de fonctionnement pour les détecteurs quantiques ( $\geq 110\text{K}$ ), permettant de réduire le poids, l'encombrement et la consommation des machines à froid.
- Un fonctionnement multispectral, c'est-à-dire une détection sur plusieurs bandes spectrales.
- L'augmentation du format des matrices (format mégapixel) et l'amélioration de leur uniformité.

Ces critères définissent ce qu'on appelle les détecteurs IR de troisième génération [Rogalski *et al.*, 2009]. Une seule filière ne peut répondre à tous ces besoins simultanément. Actuellement, plusieurs filières sont en développement pour combler ces besoins. La filière des superréseaux (SR) InAs/GaSb est une de ces filières émergentes. Elle fut proposée pour la première fois pour la détection IR en 1987 par [Smith et Mailhiot, 1987]. Cette structure SR consiste en un empilement périodique des semiconducteurs III-V InAs et GaSb. De par la nature même des matériaux et

leur structuration, les SR présentent des avantages théoriques tel qu'une énergie de bande interdite accordable, un faible courant d'obscurité dû au faible taux de recombinaison Auger ainsi qu'une masse effective élevée permettant de limiter les courants tunnels.

Plusieurs équipes à travers le monde travaillent actuellement au développement des SR InAs/GaSb. En France, l'Institut d'Electronique et des Systèmes (IES) travaille sur le sujet depuis 2002 [Rodriguez *et al.*, 2005a, 2006] et a réalisé l'ensemble des composants SR étudiés au cours de ma thèse. L'IES développe des photodiodes à SR qui sont réalisées par Epitaxie à Jet Moléculaire (EJM). L'IES s'est plus particulièrement intéressé au développement de SR InAs/GaSb pour un fonctionnement dans le moyen IR (3 - 5  $\mu\text{m}$ ), en focalisant son étude sur la flexibilité des structures SR InAs/GaSb. En effet, alors que la plupart des détecteurs SR réalisés de par le monde ont une période dite symétrique (i.e. les épaisseurs d'InAs et de GaSb dans la période sont égales), l'IES propose des structures asymétriques avec plus d'InAs que de GaSb dans la période (InAs-rich) ou inversement plus de GaSb que d'InAs (GaSb-rich).

Au début des années 2010, différents acteurs français de la détection IR (IES, CEA-LETI, ONERA, LPN) se sont réunis dans le cadre de plusieurs projets (une REI, l'ANR INTREPID et le PEA VITRIL) afin de réaliser, fin 2013, la première matrice SR InAs/GaSb fonctionnant dans le moyen IR (entre 3 et 5  $\mu\text{m}$ ). Les détails de la réalisation de cette matrice se trouvent dans la thèse de Rachid Taalat [Taalat, 2013]. Parallèlement, en 2012, trois thèses ont commencé simultanément en France sur le sujet du SR InAs/GaSb. A l'IES, Marie Delmas réalise les composants SR et cherche à optimiser les performances de ces détecteurs. A l'Onera, Edouard Giard réalise des mesures électro-optiques fines sur ces détecteurs. Enfin, ma thèse a porté sur le développement d'un outil de modélisation pour les SR InAs/GaSb.

En effet, au début de ce travail, il existait un besoin en modélisation, car malgré des premiers résultats encourageants pour des structures InAs-rich (qui présentent de faibles courants d'obscurité comparées à des structures symétriques), les détecteurs développés à l'IES n'atteignaient pas encore les rendements quantiques attendus théoriquement, qui sont censés être équivalents à ceux des détecteurs IR à l'état de l'art. Il fallait donc mieux comprendre le fonctionnement théorique de ces structures et mettre en place une modélisation qui à terme permettra la prédiction des propriétés des SR et ainsi l'orientation des nouvelles structures réalisées. De plus, le code de modélisation historique développé à l'IES [Rodriguez, 2005] ne permet pas une compréhension fine du fonctionnement de ces détecteurs, car il est limité à la seule prédiction de la longueur d'onde de coupure d'une structure SR. C'est pourquoi l'IES a fait appel à l'Onera, pour son expertise en matière de caractérisation de détecteurs IR, et à Thalès Research & Technologie (TRT), pour sa connaissance théorique et ses modèles développés pour des hétérostructures quantiques (laser à cascade quantique, multi-puits quantiques, SR). Ma thèse s'est donc déroulée en collaboration entre ses trois laboratoires.

L'objectif de ce travail était, dans un premier temps, de développer un outil de modélisation permettant de rendre compte du fonctionnement des SR actuellement réalisés à l'IES dans le moyen IR et donc d'en comprendre les limitations. Puis, dans un second temps, en utilisant les résultats obtenus au cours de cette thèse, de proposer de nouvelles structures SR pour la détection dans le lointain IR (entre 8 et 12 $\mu$ m).

Ce mémoire est composé de trois chapitres correspondants aux différentes phases de l'étude.

Le premier chapitre rappelle le contexte de la détection IR, présente le principe de fonctionnement des détecteurs SR InAs/GaSb ainsi que l'état de l'art des réalisations et outils de modélisation associés. A la fin de ce chapitre, j'exposerai les raisons qui nous ont conduit à choisir la méthode **kp** 18 bandes pour modéliser la structure de bandes et les fonctions d'onde des SR InAs/GaSb.

Dans un second chapitre, je présenterai en détail les trois types de structures SR étudiées pendant ma thèse et la méthode **kp** 18 bandes adaptée aux particularités du SR avec un alignement de type III. Je présenterai ensuite une étude de sensibilité de l'énergie de bande interdite en fonction des différents paramètres physiques en entrée de mon modèle afin de déterminer les valeurs permettant de rendre compte des propriétés optiques des SR réalisés à l'IES en fonction de la température (photoluminescence et coefficient d'absorption).

Enfin, dans le troisième chapitre, je présenterai un certain nombre de paramètres physiques calculés (masse effective, densité d'état, absorption sous champ électrique) pour les trois types de SR étudiés, ainsi que des abaques pour des SR InAs/GaSb dont la période sera composée de  $i$  MC d'InAs et  $j$  MC de GaSb (avec  $(i, j) \in [4, 23]$ ). Ces abaques pourront ensuite servir au choix de nouvelles structures SR ayant de meilleures performances, notamment dans le LWIR, où les SR InAs/GaSb pourraient apporter des améliorations aux détecteurs matriciels actuels en terme de sensibilité, d'uniformité et de stabilité temporelle des corrections. Je conclurai ce manuscrit par une comparaison globale entre les trois types de SR étudiés. Je proposerai ensuite une structure SR InAs/GaSb pour la détection dans le LWIR et j'établirai des pistes de développement de modélisation pour avoir un outil de prédiction des performances électro-optiques globales d'un détecteur SR InAs/GaSb.





## ÉTAT DE L'ART DES DÉTECTEURS SR INAS/GASB ET DE LEURS MÉTHODES DE MODÉLISATION

---

### 1.1 CONTEXTE DE LA DÉTECTION INFRAROUGE

Je présenterai ici les principes généraux de la détection infrarouge. Je parlerai ensuite des enjeux actuels et ferai des réalisations SR InAs/GaSb actuellement en développement pour y répondre.

Chaque objet porté à une température donnée émet des photons et le domaine spectral de ce rayonnement dépend de la température de l'objet. Le domaine spectral du visible est défini par l'ensemble des rayonnements vus par l'œil humain. Les rayonnements thermiques des corps, à température ambiante ( $\sim 300\text{K}$ ), que l'on cherche à observer ici sont principalement dans le domaine spectral de l'IR et ne sont pas visible à l'œil humain. Il faut donc développer des outils qui permettent la détection de ces objets. La capacité de ces détecteurs à fonctionner repose sur trois axes : la connaissance de la source, le milieu de propagation du rayonnement et la capacité du détecteur à le voir.

#### 1.1.1 *Le rayonnement infrarouge*

Le corps noir est un objet idéal totalement absorbant, c'est-à-dire qu'il absorbe l'intégralité de l'énergie électromagnétique qu'il reçoit, sans en réfléchir ni en transmettre. Ce corps noir réémet l'énergie qu'il reçoit sous la forme d'un rayonnement électromagnétique. La luminance spectrale du corps noir est alors décrite par la loi de Planck :

$$L(\lambda, T) = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{e^{(hc)/(\lambda k_B T)} - 1} \quad (\text{en } W \cdot m^{-3} \cdot sr^{-1}) \quad (1.1)$$

Où  $h$  est la constante de Planck,  $k_B$  la constante de Boltzmann,  $c$  la vitesse de la lumière dans le vide et  $T$  est la température du corps noir.

La figure 1.1 présente cette luminance pour différentes températures de corps noir. Le maximum de cette luminance se déplace vers les grandes longueurs d'onde lorsque la température diminue selon la loi de Wien :

$$\lambda_{\max}(T) = \frac{2898}{T} \quad (\lambda \text{ en } \mu m \text{ et } T \text{ en } K) \quad (1.2)$$

La surface de la terre étant à  $300\text{K}$ , les objets que l'on veut détecter peuvent être considérés comme des corps noirs autour de cette température, ils ont donc d'après

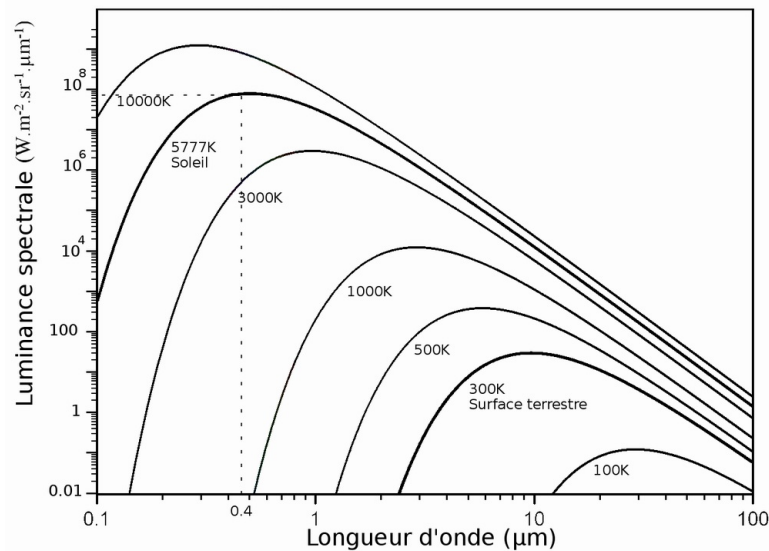


FIGURE 1.1: Luminance spectrale d'un corps noir à plusieurs températures.

la loi de Wien un maximum d'émission autour de  $10\text{ }\mu\text{m}$  dans l'infrarouge. Pour les objets dont la température est plus élevée, le maximum du spectre d'émission se déplace vers les courtes longueurs d'ondes de l'IR.

Cependant, la connaissance de la source ne suffit pas pour permettre de réaliser une détection dans l'infrarouge, il faut aussi connaître le milieu de propagation de ce rayonnement.

Le milieu de propagation est généralement l'atmosphère terrestre qui présente de fortes absorptions dans l'infrarouge, notamment du fait de molécules telles que  $\text{H}_2\text{O}$  et  $\text{CO}_2$ . La transmission de l'atmosphère dépend donc de paramètres locaux, comme le niveau d'humidité et la distance d'observation.

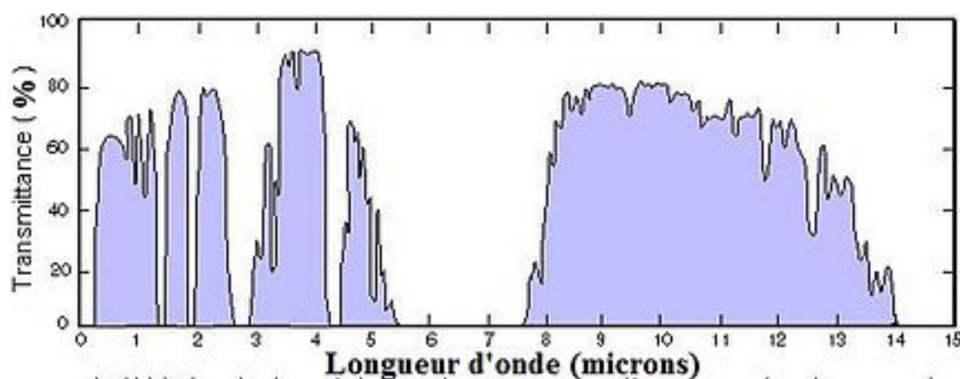


FIGURE 1.2: Transmission de l'atmosphère en fonction de la longueur d'onde.

La figure 1.2 présente un exemple de spectre de transmission de l'atmosphère. Les fenêtres de transmission de l'atmosphère dans l'infrarouge sont classées de la manière suivante :

- Le proche infrarouge (SWIR) entre  $0,7$  et  $2,5\text{ }\mu\text{m}$ .

- Le moyen infrarouge (MWIR) entre 3 et 5  $\mu\text{m}$ .
- Le lointain infrarouge (LWIR) entre 8 et 12  $\mu\text{m}$ .
- Le très lointain infrarouge (VLWIR)  $> 12 \mu\text{m}$ .

Les détecteurs IR à SR InAs/GaSb qui seront étudiés dans ce manuscrit fonctionnent dans la fenêtre de transmission du MWIR. Ils permettent la détection d'objets à des températures ambiantes mais, ils sont aussi efficaces pour les sources plus chaudes telles que les moteurs d'engin.

### 1.1.2 *Détecteurs infrarouge quantiques et enjeux actuels*

Le détecteur quantique fonctionne sur le principe de l'effet photoélectrique. L'absorption d'un photon d'une scène engendre la création d'une paire électron-trou dans le matériau. Cette paire électron-trou, en se déplaçant, crée un courant. Sa collecte par un contact sera alors la signature de la présence initiale du photon. Ce type de détecteur est rapide et performant, mais fonctionne généralement à des températures cryogéniques pour la détection dans le MWIR ou le LWIR pour limiter le bruit induit par l'agitation thermique des porteurs.

La recherche motivée par les applications de la défense a permis le développement de détecteurs fonctionnant dans l'ensemble des fenêtres de l'atmosphère. Pour couvrir ces fenêtres, différentes technologies de détecteurs quantiques existent et certaines sont suffisamment matures pour être industrialisées.

Selon la gamme de longueurs d'onde visée et les applications, différents matériaux ont été utilisés. Dans la fenêtre SWIR, les matériaux disponibles sont le MCT (Mercure Cadmium Tellure) et l'InGaAs qui domine le marché dans cette fenêtre. Dans la fenêtre MWIR, on retrouve l'InSb et le MCT, qui détectent sur une large bande spectrale, et les détecteurs QWIP (Quantum Well Infrared Photodetector) qui présentent une réponse spectrale centrée sur une longueur d'onde ajustable en fonction de la structure. Enfin dans le LWIR et VLWIR, on retrouve le MCT et les QWIP. On peut aussi citer les détecteurs Si:As et Si:Ga qui ont une détection sur très large bande spectrale, comprise entre 2 et 28  $\mu\text{m}$ , mais au prix d'un fonctionnement à très basse température (10 K).

Bien que différentes filières aient atteint un haut niveau de maturité technologique, tous les besoins ne sont pas encore couverts.

Les grands axes de R&D sont les suivants :

- Une température de fonctionnement plus élevée ( $> 110\text{K}$ ). En effet, ceci permettra de diminuer l'encombrement dû à la machine à froid et la consommation électrique du système. Dans les utilisations de caméra embarquée, ce critère est très important et permet d'augmenter la durée de vie du système.
- Une capacité de fonctionnement sur plusieurs bandes spectrales. D'un point de vue industriel, il est très avantageux qu'une même filière permette de produire des détecteurs sensibles dans les différentes fenêtres de transmission de l'IR. La filière devra donc notamment être en mesure de produire des détecteurs

pour le VLWIR, qui est une fenêtre imposée par des applications spatiales et militaires. De plus, un avantage de cette filière sera le fonctionnement multispectral, où un même détecteur sera capable de fonctionner à différentes bandes spectrales.

- Des performances électro-optiques élevées (fort rendement quantique et faible courant d'obscurité). Le détecteur devra présenter un rapport signal à bruit satisfaisant, ce critère dépendant bien sûr des différentes applications.
- Une bonne uniformité et une taille de pixel faible permettant de réaliser des matrices de grand format.

Le SR InAs/GaSb est une filière émergente qui, vis à vis des critères précédents, peut apporter des progrès par rapport aux différentes filières déjà implantées : l'InSb, le HgCdTe et les QWIP.

## 1.2 LA STRUCTURE QUANTIQUE À SUPERRÉSEAU

Je vais dans un premier temps faire une présentation générale de la structure quantique à superréseau, ainsi que de ces principales caractéristiques. J'expliquerai ensuite l'intérêt de ces structures pour la détection infrarouge. Enfin, je finirai par l'état de l'art des détecteurs infrarouge à base de SR développés au cours de ces 25 dernières années au niveau mondial.

### 1.2.1 *Le superréseau*

Le superréseau est un empilement périodique de couches fines, typiquement de quelques monocouches (MC) à plusieurs dizaines de monocouches de différents matériaux dans une direction donnée (figure 1.3). Le nom de "superréseau" vient d'ailleurs du fait que le réseau de matériaux de la structure introduit une périodicité artificielle qui se superpose à la périodicité naturelle du cristal.

#### 1.2.1.1 *Les alignements de bande*

La structure SR est réalisée par croissance successive de semiconducteurs ayant des énergies de bande interdite  $E_g$  différentes sur un substrat. L'alignement des bandes de valence et de conduction dans la période varie en fonction des matériaux choisis, comme montré schématiquement pour les bandes de valence sur le bord droit de la figure 1.3. On recense trois types d'alignement, qui sont résumés sur le schéma de la figure 1.4. Dans le cas de l'alignement de type I, le gap du matériau 2 est contenu dans le gap du matériau 1. Pour un alignement de type II, les énergies de bande interdite des matériaux sont décalées l'une par rapport à l'autre, mais la bande de conduction (ou de valence) du matériau 2 est contenue dans le gap du matériau 1. Enfin l'alignement de type III est un cas particulier de l'alignement de type II où les énergies de bande interdite des deux matériaux sont totalement décalées les unes par rapport aux autres : le bas de la bande de conduction du matériau 2 se trouve à une

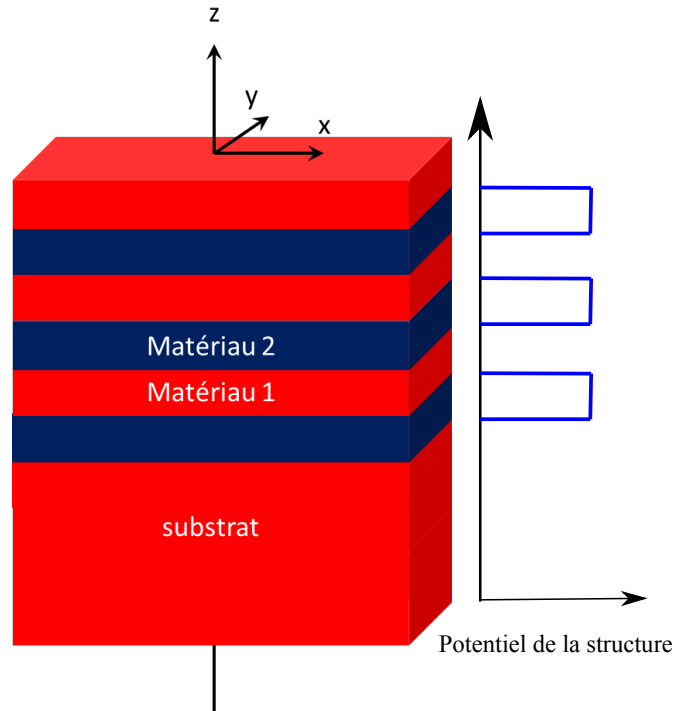


FIGURE 1.3: Représentation schématique d'une structure quantique à superréseau.

énergie inférieure à celle de la bande de valence du matériau 1. Le SR InAs/GaSb étudié dans cette thèse est un SR de type III.

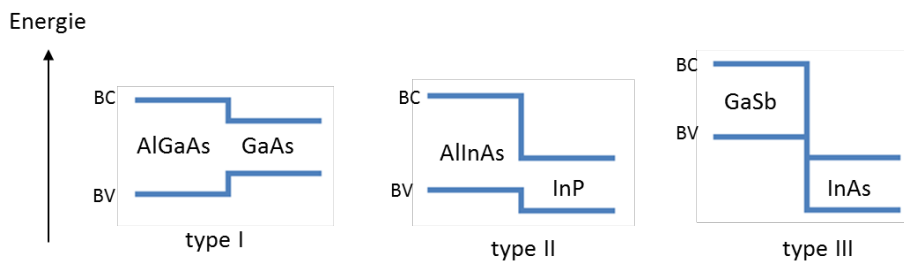


FIGURE 1.4: Représentation schématique des différents types d'alignement possibles pour une structure quantique à SR.

#### 1.2.1.2 Les interfaces des SR

Les SR pour lesquels un atome commun est présent dans les deux matériaux de la période est appelé SR à atome commun (SR-AC) comme par exemple le SR AlAs/GaAs. Le SR InAs/GaSb est un SR sans atome en commun (SR-SAC), ce qui entraîne l'apparition de deux interfaces possibles. La figure 1.5 présente schématiquement les périodes de ces deux types de structures ainsi que leurs interfaces respectives. Nous pouvons voir que dans le cas du SR-AC, il n'y a pas apparition d'un matériau distinct à l'interface de la période du fait de cet atome en commun (figure 1.5b). Dans le

cas du SR-SAC, on voit apparaître un nouveau matériau à l'interface. La figure 1.5a montre d'ailleurs, que selon l'empilement, il y a deux possibilités. Si l'InAs est sur le GaSb, l'interface est une monocouche (MC) de GaAs ; dans le cas contraire, c'est une MC d'InSb.

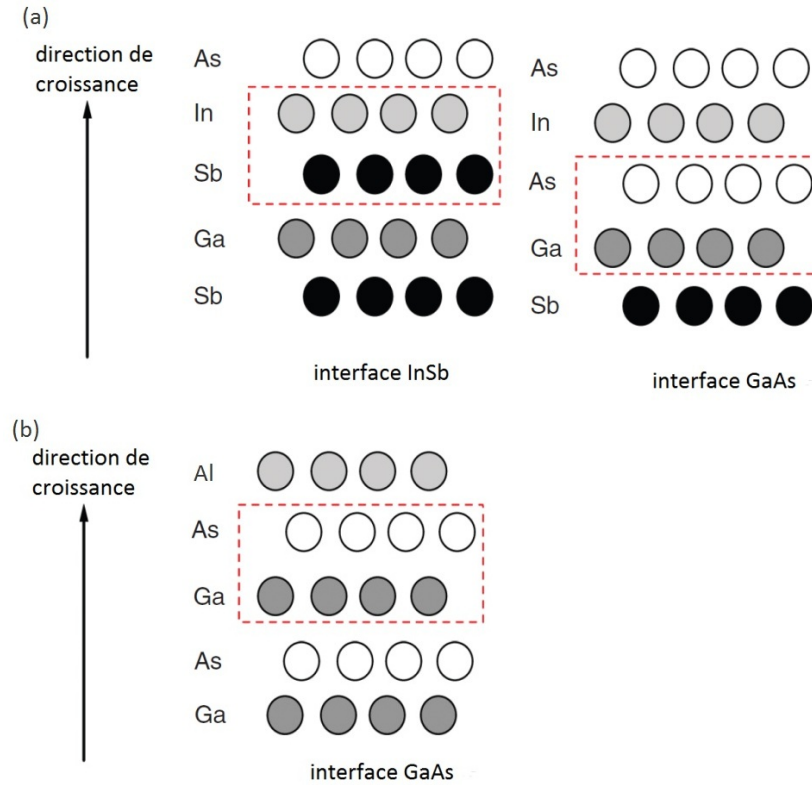


FIGURE 1.5: Représentation schématique des interfaces entre les matériaux d'un période pour un SR-SAC (a) et pour un SR-AC (b)

### 1.2.1.3 Notion de minibande

Pour bien comprendre le phénomène d'apparition des minibandes, commençons par étudier le cas simple de deux puits quantiques identiques juxtaposés. Chacun des puits possède deux niveaux d'énergie discrets (figure 1.6b). La proximité des puits induit un couplage qui fait apparaître de nouveaux niveaux d'énergie séparés d'une énergie caractéristique de ce couplage, dépendant de la distance entre les puits et de leur profondeur. Quand on augmente le nombre de puits couplés, le nombre de niveaux d'énergie augmente proportionnellement et l'écart entre ces niveaux diminue (figure 1.6c).

De plus, Dans le cas du SR, l'énergie thermique des porteurs est supérieure à l'écart entre les niveaux d'énergie discrets : ils ne sont plus localisés sur les différents niveaux d'énergie discrets mais sur un continuum que l'on nomme minibande.

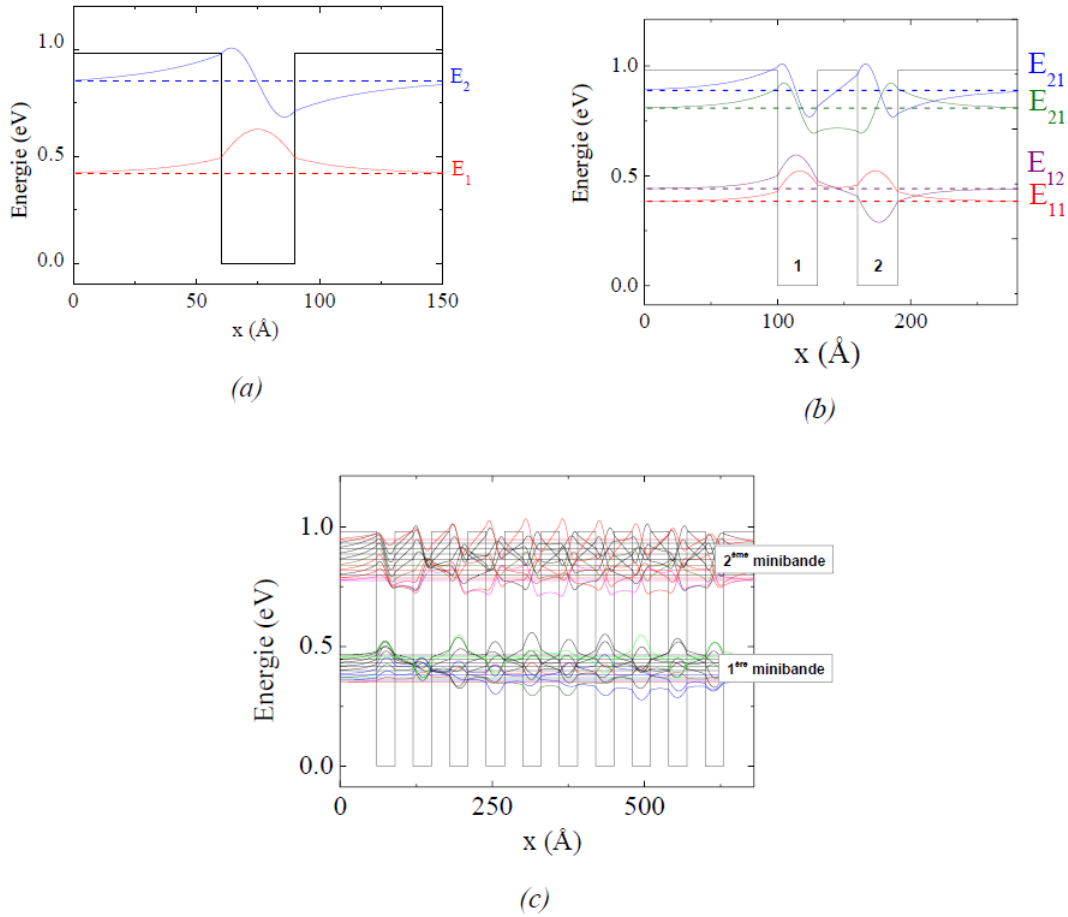


FIGURE 1.6: Niveaux d'énergies et fonctions d'onde dans un puits quantique unique (a), deux puits quantiques (b), 10 puits quantiques formant une structure superréseau (c). Ici sont représentées uniquement les deux premières minibandes pour la bande de conduction. Figure issue de [Cervera, 2011]

Il se crée donc dans le SR une nouvelle structuration en énergie de bandes larges où les porteurs se trouvent délocalisés sur l'ensemble de la structure. Le SR retrouve donc un fonctionnement semblable à celui d'un semiconducteur massif.

De ce fait, L'absorption dans le SR a lieu entre minibandes : l'absorption d'un photon provoque la transition d'un électron d'une minibande de valence vers une minibande de conduction. L'énergie de bande interdite du SR correspond à la différence d'énergie entre le haut de la première minibande de valence et le bas de la première minibande de conduction. Il s'agit donc d'une absorption interbande. Enfin, dans un superréseau, le porteur peut se déplacer sur l'ensemble de la structure par effet tunnel et si l'épaisseur de la période est suffisamment faible, sa fonction d'onde est donc fortement délocalisée dans la structure SR.



### 1.2.2 Intérêt du superréseau InAs/GaSb pour la détection infrarouge

Cette partie présente les principaux avantages du SR pour répondre aux problématiques actuelles de la détection infrarouge et dans quelle mesure il est aujourd'hui considéré comme une alternative aux filières déjà en place.

#### 1.2.2.1 Accordabilité de la longueur d'onde de coupure

L'énergie de bande interdite d'un SR est directement liée au choix des semiconducteurs de la période et à leurs épaisseurs. Par exemple, lorsque l'épaisseur des deux matériaux est la même dans la période, l'énergie de bande interdite du SR augmente quand l'épaisseur de la période diminue. Dans le cas du SR de type I, l'énergie de bande interdite minimum que peut atteindre le SR est égale à celle du matériau qui a la plus petite énergie de bande interdite. Pour un SR de type II avec un alignement identique à celui de la figure 1.4, l'énergie de bande interdite minimum atteignable par le SR est définie par la différence d'énergie entre la bande de valence du matériau 1 et la bande de conduction du matériau 2.

Enfin dans le cas d'un alignement de type III, comme le montre le potentiel du SR InAs/GaSb de la figure 1.4, il n'existe pas réellement d'énergie de bande interdite. C'est le couplage dans le SR qui fait apparaître des minibandes et permet l'ouverture d'un gap. Aussi, n'importe quelle longueur d'onde de coupure est théoriquement accessible comme le montre la courbe orange de la figure 1.7. Des SR avec des longueurs d'onde de coupure de 32  $\mu\text{m}$  ont d'ailleurs été réalisés [Wei et al., 2002a].

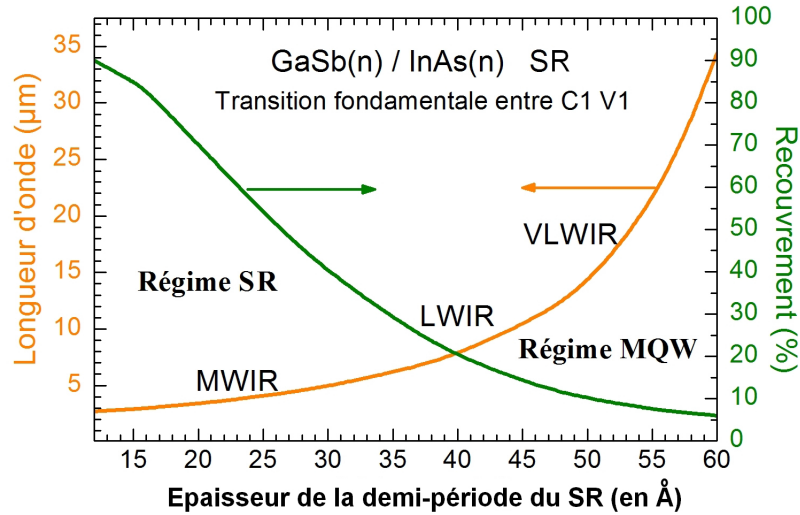


FIGURE 1.7: Évolution de la longueur d'onde de coupure (en orange) et du recouvrement des fonctions d'onde (en vert) en fonction de l'épaisseur de la demi période pour un superréseau InAs/GaSb symétrique opérant à 80K. Figure issue de [Cervera, 2011].

Cependant, le recouvrement entre les fonctions d'onde d'électron et de trou dépend aussi de l'épaisseur de la période comme on le voit sur la courbe verte de la figure

1.7. Ceci devient contraignant dans le régime LWIR, car le recouvrement diminue avec l'épaisseur de la période.

En effet, dans les SR symétriques (l'épaisseur d'InAs et de GaSb dans la période sont égales) il faut augmenter l'épaisseur des deux matériaux pour atteindre la gamme des longueurs d'onde dans le LWIR. Or, en augmentant l'épaisseur des puits et des barrières de la structure, le régime de fonctionnement du SR devient progressivement celui d'un multipuits quantique où les puits sont découplés. Cette diminution du recouvrement diminue l'absorption du SR et donc ses performances électro-optiques. Mais des solutions existent pour répondre à ce problème notamment grâce au développement de SR asymétriques où la quantité d'InAs dans la période est plus importante que celle de GaSb.

Le SR InAs/GaSb a donc la possibilité de couvrir l'ensemble des bandes spectrales du MWIR au VLWIR. De plus, il est possible de créer dans un même SR plusieurs structurations avec des épaisseurs de période différentes, permettant une détection multispectrale. Intrinsèquement le SR répond donc aux principaux enjeux de la détection IR pour un développement industriel de cette filière.

#### 1.2.2.2 Diminution des recombinaisons Auger

La détection d'un photon dans un détecteur se fait grâce à deux mécanismes successifs :

1. l'absorption du photon qui provoque la création d'une paire électron-trou.
2. la collecte du porteur minoritaire (électron ou trou suivant la structure) qui crée un photocourant.

Cependant, ces porteurs ont une durée de vie limitée, ils doivent donc être collectés avant de se recombiner. Il existe trois types de recombinaison présentes dans l'ensemble des semiconducteurs : la recombinaison radiative, la recombinaison Shockley-Read-Hall (SRH) et la recombinaison Auger.

La recombinaison Auger est le facteur limitant des performances des détecteurs IR à haute température [Mohseni et Razeghi, 1998]. Or, comme nous allons le voir, théoriquement le taux de recombinaison Auger est plus faible dans les structures SR que dans les autres matériaux et ce résultat a été démontré expérimentalement [Youngdale et al., 1994].

Le phénomène de recombinaison Auger est un mécanisme à trois corps : 2 électrons et 1 trou ou 2 trous et 1 électron. Les recombinaisons Auger prédominantes dans les matériaux semiconducteurs sont :

- La recombinaison Auger 1 : l'énergie créée par la recombinaison d'une paire électron-trou est transférée à un autre électron, initialement dans l'état  $k_1$  sur la bande de conduction, qui va alors passer dans l'état  $k_2$  sur la même bande de conduction (figure 1.8a). Elle est prédominante dans les matériaux de type n.
- La recombinaison Auger 7 : l'énergie créée par la recombinaison d'une paire électron-trou est alors transférée à un trou léger qui va alors être transféré sur

la bande de trous lourds (figure 1.8b). Elle est prédominante dans le matériaux de type p.

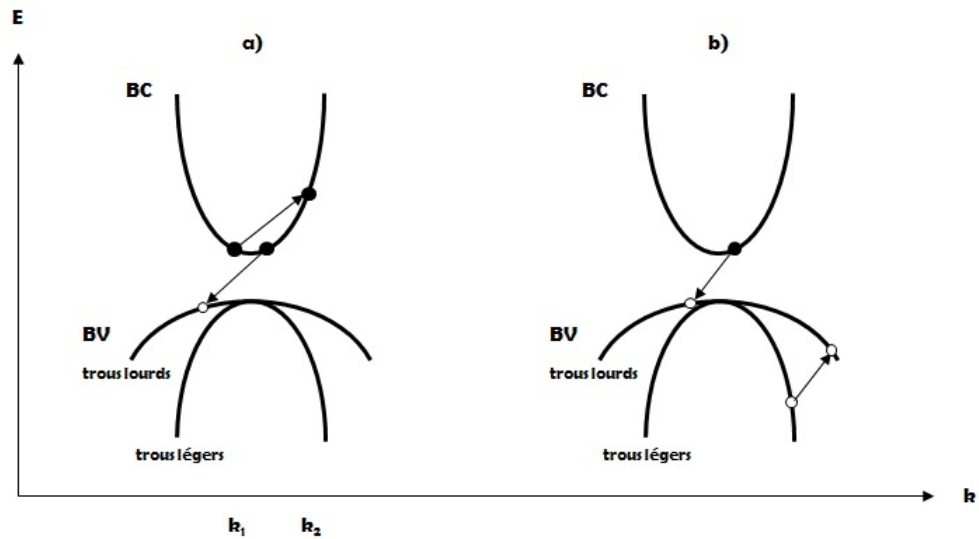


FIGURE 1.8: Schéma présentant les principaux phénomènes de recombinaison Auger : a) Auger 1 b) Auger 7.

Or, dans un SR InAs/GaSb la contrainte imposée par le substrat, sur lequel est réalisée la croissance, lève la dégénérescence entre la bande de valence de trous lourds et celle de trous légers. La transition pour un trou entre ces deux bandes devient alors plus difficile, diminuant la recombinaison de type Auger 7.

De plus, la structuration du SR crée un repliement des bandes dans la direction de croissance qui se retrouvent alors très aplaties. La bande de conduction étant plus plate dans cette direction, la recombinaison Auger 1 s'en retrouve alors diminuée.

Du fait de la diminution des effets Auger dans les SR InAs/GaSb, ces détecteurs ont un rapport signal à bruit théorique meilleur que les détecteurs des autres filières et devraient donc pouvoir fonctionner à plus hautes température à iso-performance. Cependant, les réalisations actuelles de SR n'arrivent pas encore à atteindre ces limites théoriques.

### 1.2.2.3 Masse effective élevée

Une observation empirique permet de remarquer que la masse effective des électrons d'un semiconducteur est proportionnelle à son énergie de bande interdite [Kane, 1957]. Aussi, les semiconducteurs qui fonctionnent dans les gammes de longueur d'onde qui nous intéressent (MWIR et LWIR) ont des énergies de bande interdites assez faible et donc de petites masses effectives des électrons. Or, Les courants tunnels sont d'autant plus forts que la masse effective des électrons est faible, ce qui crée un bruit supplémentaire dans les détecteurs IR.

Dans le SR InAs/GaSb, la masse effective n'est pas proportionnelle à l'énergie de

bande interdite, elle est dépendante de la masse effective des matériaux constituant la période. Ces structures ont donc le potentiel pour faire de la détection à très faible énergie de bande interdite tout en limitant les effets dus au courant tunnel, ce qui est très avantageux pour un fonctionnement dans le VLWIR.

Cependant, cet avantage est à relativiser du fait que le transport des porteurs sera désavantagé par une augmentation de la masse effective. Un compromis est donc à trouver dans le design du détecteur selon l'application visée.

#### 1.2.2.4 Utilisation de matériaux III-V

La filière IR qui domine principalement le marché actuellement est la filière MCT, donc un détecteur qui est composé d'un alliage de trois matériaux II-VI, contrairement aux SR InAs/GaSb qui sont composés de deux matériaux III-V. Or, l'utilisation de matériaux III-V, plutôt que d'un alliage de matériaux II-VI, permet une meilleure stabilité de la structure et une meilleure uniformité de la réponse des pixels.

En effet, la croissance des matériaux III-V est mieux maîtrisée que celle des matériaux II-VI. Ceci permet d'envisager réaliser des matrices de très grands formats avec des SR InAs/GaSb à plus faible coût de production que des matrices MCT, car plus facilement reproductibles, ce qui est un avantage pour l'industrialisation d'une nouvelle filière.

### 1.2.3 Etat de l'art des détecteurs à base de superréseaux InAs/GaSb

#### 1.2.3.1 Les figures de mérite

La performance ultime d'un détecteur est limitée par son courant d'obscurité, c'est le courant électrique produit par la photodiode en l'absence de tout éclairage. La figure de mérite intéressante à utiliser est la densité de courant d'obscurité :

$$J_{obs} = \frac{I_{obs}}{S} \quad (A/cm^2) \quad (1.3)$$

Où  $I_{obs}$  est le courant d'obscurité et  $S$  la surface du détecteur. De plus, la densité de courant d'obscurité étant dépendante de la tension appliquée à la diode, une autre figure de mérite largement utilisée est le  $R_0A$ , défini de la manière suivante :

$$R_0A = \left( \frac{\partial J_{obs}}{\partial V} \right)_{V=0}^{-1} \quad (\Omega \cdot cm^2) \quad (1.4)$$

Où  $V$  est le potentiel appliqué. On cherchera donc à maximiser le  $R_0A$ . Ces figures de mérites permettent de rendre compte du bruit à l'obscurité d'un détecteur.

La seconde figure de mérite importante est le rendement quantique externe qui est le rapport entre le nombre de charges collectées et le nombre de photons incidents sur la photodiode. Cette grandeur permet de rendre compte de deux mécanismes de fonctionnement du détecteur : l'absorption des photons et la collecte des porteurs créés.

Enfin, la détectivité spécifique est la figure de mérite qui explicite le rapport signal à bruit et qui est donc utilisée pour les détecteurs IR :

$$D^* = \frac{q\lambda\eta}{hc} \cdot \frac{\sqrt{S\Delta f}}{\text{Bruit}_{\text{total}}} \quad (\text{Jones}) \quad (1.5)$$

Où  $c$  est la vitesse de la lumière,  $h$  la constante de Planck,  $\lambda$  la longueur d'onde,  $q$  la charge élémentaire,  $\eta$  le rendement quantique,  $S$  la surface du détecteur,  $\Delta f$  la largeur de la bande passante et tout ceci divisé par le bruit total de la diode. L'unité de la détectivité spécifique est le Jones =  $1 \text{ cm} \cdot \sqrt{\text{Hz}} \cdot \text{W}^{-1}$ . Le  $D^*$  doit être maximisé. Enfin, une figure de mérite généralement employée pour caractériser les caméras (détecteur + optique), mais parfois utilisée par extension pour les détecteurs seuls, est la différence de température équivalente au bruit (NETD pour Noise Equivalent Temperature Difference). La NETD, exprimée en Kelvin, est la différence de température du corps noir utilisé comme signal incident de telle manière à ce que le rapport signal à bruit soit égal à 1. Cette figure de mérite est d'autant plus faible que le détecteur est sensible, mais présente l'inconvénient d'être très dépendante des conditions de mesure (ouverture de l'écran froid, temps d'intégration, etc).

### 1.2.3.2 Performances du SR InAs/GaSb dans le monde

La grande accordabilité en longueur d'onde de coupure du SR InAs/GaSb lui permet de fonctionner dans l'IR, du MWIR au VLWIR. Aussi, je présenterai les principaux résultats mondiaux sur les détecteurs à base de SR InAs/GaSb en fonction de la gamme spectrale de fonctionnement.

De plus, ces 10 dernières années, de nombreux groupes sont passés à de nouveaux types d'architectures, plus complexes que la photodiode pin, dites structures à barrières (M, nBn, CBIRD). Le fonctionnement détaillé des différentes structures à barrières, dont je parle ici, est présenté dans l'annexe A.

- Pour le MWIR

Le tableau 1.1 résume les principaux résultats obtenus de par le monde sur les SR dans le MWIR. Dans cette gamme de longueurs d'onde, les SR InAs/GaSb sont souvent utilisés en structure pin, dont le fonctionnement est rappelé dans l'annexe A.

Les meilleurs résultats sont à ce jour obtenus par les SR InAs/GaSb développés par l'équipe CQD (Center for Quantum Devices) qui utilise la structure M. Ils réalisent notamment des matrices  $320 \times 256$  SR InAs/GaSb fonctionnant à des hautes températures (150 K) ayant des rendements quantiques de 67%.

- Pour le LWIR

De la même manière, le tableau 1.1 résume les principaux résultats obtenus de par le monde sur les SR dans le LWIR.

A ces longueurs d'onde, des matrices mégapixel ont été réalisées par les groupes CQD et JPL. La matrice mégapixel du CQD présente un rendement quantique 78% et une NETD de 23,6mK, cependant ce résultat est à relativiser. En effet, en absence

TABLE 1.1: Résumé de l'état de l'art MWIR pour les SR InAs/GaSb.

Groupe (référence)	SR InAs/GaSb (ZA en $\mu\text{m}$ ) structure	$\lambda_c$ ( $\mu\text{m}$ )	T (K)	rendement quantique (%)	$R_0A$ ( $\Omega \cdot \text{cm}^2$ )	$D^*$ (Jones)	NETD (mK)
CQD [Wei <i>et al.</i> , 2005]	8/11 (2) monoélément pin	5	300	25	$1,5 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^9$	-
CQD [Razeghi <i>et al.</i> , 2011]	(2) monoélément et matrice M	4,2	150	60	-	$1 \cdot 10^{12}$	-
CQD [Chen <i>et al.</i> , 2015]	(3) matrice $320 \times 256$ M	4,9	150	67	-	$1,2 \cdot 10^{12}$	11
Fraunhofer [Walther <i>et al.</i> , 2005]	9,5/12 (1,25) monoélément pin	5,4	77	30	$4 \cdot 10^5$	-	-
Fraunhofer [Rutz <i>et al.</i> , 2011]	matrice $384 \times 288$ bispectrale pin	3-4 4-5	77	-	-	-	17,9 9,9
CHTM [Plis <i>et al.</i> , 2007]	8/8 (1,5) monoélément pin	4,1	82	18	$1 \cdot 10^5$	$2 \cdot 10^{12}$	-
CHTM [Rodriguez <i>et al.</i> , 2007] [Kim <i>et al.</i> , 2008]	8/8 monoélément et matrice nBn	4,2	300	18	-	$1 \cdot 10^9$	-
SCD [Klipstein <i>et al.</i> , 2013]	8,6/13,5 monoélément et nBn	4,4	80	-	-	-	-
IES [Giard <i>et al.</i> , 2014b]	7/4 matrice $320 \times 256$ pin	5	80	42	-	-	-

TABLE 1.2: Résumé de l'état de l'art LWIR pour les SR InAs/GaSb.

Groupe (référence)	SR InAs/GaSb (ZA en $\mu\text{m}$ ) structure	$\lambda_c$ ( $\mu\text{m}$ )	T (K)	rendement quantique (%)	$R_0A$ ( $\Omega \cdot \text{cm}^2$ )	$D^*$ (Jones)	NETD (mK)
CQD [ <a href="#">Nguyen et al., 2007</a> ]	13/7 (6) mono élément M	12	77	54	100	$2,2 \cdot 10^{11}$	-
CQD [ <a href="#">Delaunay et al., 2007</a> ]	13/7 (3) matrice $320 \times 256$ pin	12	150	31	13	$2 \cdot 10^{11}$	340
CQD [ <a href="#">Manurkar et al., 2010</a> ]	13/7 (4) matrice $1024 \times 1024$ M	11	77	78	166	$6 \cdot 10^{11}$	23,6
JPL [ <a href="#">Gunapala et al., 2011</a> ]	14,5/7 (1,95) matrice $1024 \times 1024$ CBIRD	11,5	80	21	-	-	53

de toute indication précise, on peut supposer que, contrairement aux autres mesures présentées précédemment, les mesures ont été réalisées sur une matrice avec un traitement antireflet et en double passage, ce qui explique certainement le record obtenue pour le rendement quantique.

- Pour le VLWIR

Le VLWIR est un domaine spectral encore peu adressé par le SR InAs/GaSb. Aucun résultat sur une matrice SR InAs/GaSb fonctionnant dans le VLWIR n'a encore été publié à ce jour. L'équipe CQD a aussi publié des résultats sur une photodiode à base de SR InAs/InAsSb pour la détection dans le VLWIR [[Hoang et al., 2014](#)]. Cependant des réserves ont été émises quand à l'utilisation de ce type de structure SR en raison de faibles taux de recouvrement des fonctions d'onde [[Klipstein, 2015](#)] et l'utilisation des SR InAs/InAsSb reste encore sujet à débats.

En conclusion, je présente sur la figure 1.9 un comparatif au niveau des  $R_0A$  entre l'état de l'art des détecteurs MCT en 2011 et les résultats de différentes équipes travaillant sur le SR InAs/GaSb.

Notamment le Fraunhofer en Allemagne et les principales équipes américaines NRL (Naval Research Laboratory) et l'équipe CQD (indiqué par NU, pour Northwestern University sur le graphique). A cette liste on peut rajouter notamment le CHTM (Center for High Technical Materials) qui fait partie des principaux acteurs interna-

TABLE 1.3: Résumé de l'état de l'art VLWIR pour les SR InAs/GaSb.

Groupe (référence)	SR InAs/GaSb (ZA en $\mu\text{m}$ ) structure	$\lambda_c$ ( $\mu\text{m}$ )	T (K)	rendement quantique (%)	$R_0A$ ( $\Omega \cdot \text{cm}^2$ )	$D^*$ (Jones)	NETD (mK)
SCD [Klipstein <i>et al.</i> , 2013]	(2) monoélément nBn	10	77	35	-	-	-
CQD [Wei <i>et al.</i> , 2002b]	17/7 (2) monoélément	18,8	80	40	0,55	$4,5 \cdot 10^{10}$	-
CQD [Hood <i>et al.</i> , 2005]	14/5 (2) monoélément	17	77	30	0,08	$7,6 \cdot 10^9$	-

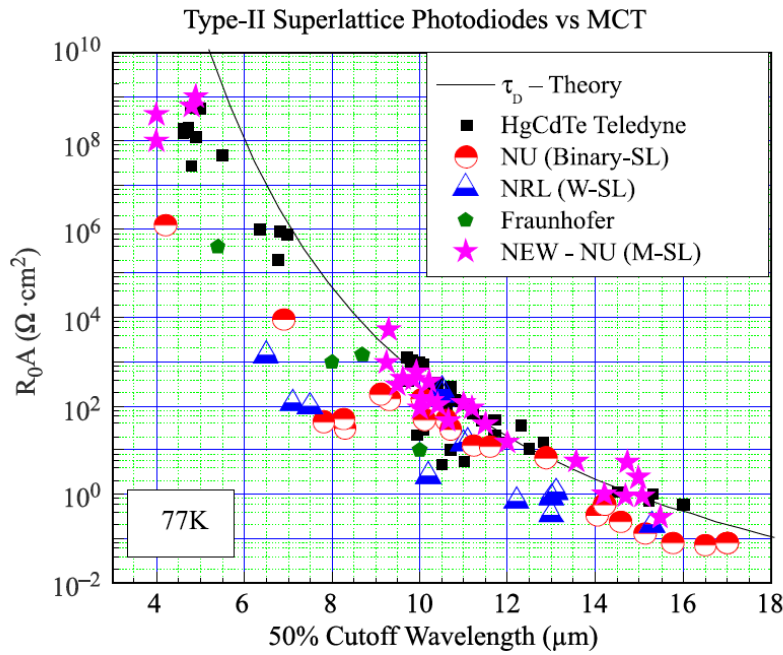


FIGURE 1.9:  $R_0A$  en fonction de la longueur d'onde de coupure pour différents détecteurs à superréseau, comparés à l'état de l'art du MCT en 2011 [Razeghi *et al.*, 2011]. L'équipe CQD est indiquée par NU et présente des résultats de détecteurs SR avec une structure pin (NU (Binary-SL)) et une structure M (NEW - NU (M-SL)).



tionaux de ce domaine. Cette figure montre que la filière des détecteurs à SR arrive à obtenir des résultats parfois équivalent au MCT, en particulier dans le domaine spectral du LWIR.

Cependant, la figure de mérite du  $R_0A$  permet de rendre compte du niveau de courant d'obscurité dans le détecteur, i.e. sa limite minimum de bruit, mais ne prend pas en compte le signal reçu par le détecteur : la détectivité, le rendement quantique ou encore la NETD. Les détecteurs MCT ont un rendement quantique moyen de 70% et une NETD de 27mK [Rogalski *et al.*, 2009; King *et al.*, 2006]. Or, j'ai présenté auparavant un état de l'art des SR avec des rendements quantiques autour de 20 ou 30 %, seul le CQD arrive à obtenir des résultats allant jusqu'à 60 %.

En conclusion, même si la filière SR InAs/GaSb pour la détection IR est aujourd'hui arrivée à une certaine maturité technologique dans différents laboratoires américains, permettant un développement industriel, les performances de ces détecteurs sont encore inférieures aux limites théoriques. Ceci a conduit plusieurs groupes à développer des outils de modélisation pour comprendre les limites physiques des détecteurs à SR InAs/GaSb. Nous allons voir que la modélisation des SR InAs/GaSb est particulièrement délicate. Les différents groupes qui se sont intéressés au problème, ont proposé un ensemble de solutions que je vais présenter dans le paragraphe suivant.

### 1.3 ETAT DE L'ART DE LA MODÉLISATION

Comme nous l'avons vu précédemment, les structures quantiques à SR offrent une grande flexibilité grâce au choix des semiconducteurs de la période, ainsi que de leur épaisseur. Aussi, les modélisations pour les SR vont avoir un rôle particulier à jouer. En effet, la structuration SR va permettre de modifier la structure de bande et ainsi les propriétés électro-optiques de ces structures.

Les principales modélisations qui ont été utilisées pour le calcul de structure de bande et de fonctions d'onde de SR sont des méthodes empiriques, c'est-à-dire des modèles pour lesquels la structure électronique des matériaux constituant le SR est supposée connue et invariante quand les matériaux sont associés pour former le SR. Les paramètres en entrée nécessaires aux calculs à l'aide de ces méthodes seront donc issus des mesures expérimentales sur les matériaux massifs constituant le SR.

L'autre méthode de modélisation est la méthode *ab initio* qui décrit le matériau à un niveau atomique en prenant en compte les équations de la mécanique quantique sans postulat additionnel. C'est une méthode longue et lourde d'un point de vue informatique et qui fait une description atomistique du SR, donc le temps de calcul dépend de la taille du SR modélisé. Elle est beaucoup moins utilisée que les méthodes empiriques pour modéliser les SR et, par nature, ne peut s'appliquer qu'à des structures SR de très faible épaisseur de période. De plus, à ma connaissance, cette méthode n'a jamais été utilisée pour les SR InAs/GaSb.

Dans un premier temps, je ferai une présentation théorique générale des méthodes de modélisation empirique appliquées au SR. Je présenterai ensuite les particularités et limites de chacune de ces méthodes. Enfin, je conclurai sur la méthode qui a été choisie dans notre cas pour modéliser les SR InAs/GaSb et sur les raisons de ce choix.

#### 1.3.1 Considérations théoriques générales

Pour avoir une précision suffisante lors de la modélisation des structures SR il est important d'inclure les interactions dues à la bande de spin-orbit et aux contraintes. Cependant, dans un souci de simplicité, ces interactions peuvent être omises dans le traitement général du problème de la résolution de l'équation de Schrödinger. Ces interactions seront réintroduites par la suite dans le formalisme matriciel sans introduire d'inexactitude dans la méthode.

La détermination de la structure de bande et des fonctions d'onde part de la résolution de l'équation de Schrödinger pour un électron, dans l'approximation des électrons indépendants, dans un potentiel périodique dont l'hamiltonien est de la forme :

$$H_{SR} = \frac{p^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \quad (1.6)$$

où  $V(\vec{r})$  est le potentiel de notre structure,  $p$  la quantité de mouvement,  $m_0$  la masse de l'électron et  $\vec{r}$  le vecteur position de l'électron.  
l'équation à résoudre est donc :

$$H\Psi_{n,\vec{k}} = E\Psi_{n,\vec{k}} \quad (1.7)$$

Pour laquelle les fonctions d'onde  $\Psi_{n,\vec{k}}$  sont développées sur une base de fonctions  $\Phi_{\alpha,\vec{k}}$ .

$$\Psi_{n,\vec{k}} = \sum_{\alpha} a_{n,\alpha}(\vec{k}) \Phi_{\alpha,\vec{k}} \quad (1.8)$$

La résolution de ce problème se fait à un vecteur d'onde  $\vec{k}$  donné pour lequel les énergies  $E_n(\vec{k})$  et les fonctions d'onde  $\Psi_{n,\vec{k}}$  sont calculées, par la résolution d'une équation aux valeurs propres.

Les trois bases les plus courantes pour l'écriture des fonctions d'onde sont les suivantes :

1. Les ondes planes :

$$\Phi_{\vec{G},\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i(\vec{k}+\vec{G})\cdot\vec{r}} \quad (1.9)$$

2. Les fonctions de Bloch en centre de zone de Brillouin :

$$\Phi_{b,\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_b(\vec{r}) \quad (1.10)$$

3. Les fonctions tight-binding :

$$\Phi_{b,\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m \sum_j e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_j+\vec{\tau}_m)} f_{b,m}(\vec{r}-\vec{R}_j-\vec{\tau}_m) \quad (1.11)$$

Où  $\Omega$  est le volume de la cellule élémentaire,  $N$  est le nombre de cellule unitaire,  $\vec{G}$  est un vecteur du réseau réciproque,  $u_b$  est une fonction de Bloch en centre de zone,  $\vec{R}_j$  est le vecteur position de la cellule élémentaire numéro  $j$  dans la structure SR entière,  $\vec{\tau}_m$  est la position de l'atome numéro  $m$  dans la cellule élémentaire et  $f_{b,m}$  est une fonction d'orbitale atomique centrée sur l'atome localisé à la position  $\vec{\tau}_m$ .

La principale approximation, commune à ces trois méthodes, est le choix du sous-espace de la base dans lequel on réalise le calcul. En effet, dans l'équation 1.8, la base d'expression de la fonction d'onde est tronquée et le choix de cette troncature est critique pour la précision de la modélisation : plus on prend d'éléments, plus on est précis mais au risque d'alourdir inutilement le calcul. C'est un compromis qui dépend de la précision que l'on souhaite obtenir.

L'hamiltonien est alors écrit dans la base choisie pour l'expression des fonctions d'onde : ceci donne une matrice pour un vecteur d'onde  $\vec{k}$  donné dont la diagonalisation donne, d'après l'équation 1.7, la structure de bande et les fonctions d'onde de la structure modélisée.

Cependant, les bases choisies entraînent des différences dans le traitement de ce problème et sur les limites de ces méthodes. Je parlerai dans un premier temps de la méthode tight-binding et de la méthode des pseudopotentiels empiriques qui sont des méthodes atomistiques, c'est-à-dire pour lesquelles la description de la structure SR se fait à un niveau atomique. La méthode **kp** avec approximation de la fonction enveloppe (AFE), dont je parlerai en dernier, utilise quant à elle une description des matériaux massifs constituant la période du SR.

### 1.3.2 La méthode tight-binding

La méthode tight-binding empirique (ETBM : Empirical Tight-Binding Method) provient des travaux de Slater et Koster en 1954 [Slater et Koster, 1954]. A l'origine, cette méthode reposait sur une écriture des fonctions d'onde à partir d'une combinaison linéaire des orbitales atomiques. Cependant, cette méthode n'était pas utilisable du fait de la non-orthogonalité des orbitales atomiques. Ce problème fut résolu par la modification des orbitales atomiques en orbitales de Löwdin [Löwdin, 1950]. Ce dernier crée des orbitales qui ont la même symétrie que les orbitales atomiques dont elles sont issues et, qui du fait de leur orthogonalité, peuvent servir de base pour une résolution de la structure électronique de semiconducteurs.

Dans cette représentation, les fonctions d'onde s'écrivent sous la forme :

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_b \sum_j \sum_m e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_j + \vec{\tau}_m)} a_{m,b} f_{m,b}(\vec{r} - \vec{R}_j - \vec{\tau}_m) \quad (1.12)$$

Où  $b$  parcourt les différentes orbitales de Löwdin prises en compte dans le calcul,  $j$  parcourt les différentes cellules élémentaires de la structure et enfin  $m$  parcourt les différents atomes qui composent une cellule élémentaire.

Il convient ici de décider du nombre d'orbitales gardées dans ce calcul pour chaque atome. Dans la forme la plus simple du calcul, l'orbitale  $s$  peut être la seule considérée. Cependant, pour avoir une précision suffisante pour des semiconducteurs, et plus particulièrement ceux à gap direct, il faut à minima prendre en compte 4 orbitales :  $s$ ,  $p_x$ ,  $p_y$  et  $p_z$ . Mais cela ne suffit pas dans le cas des SR, aussi des orbitales supplémentaires ont été utilisées pour les décrire précisément dans différents travaux : l'orbitale excitée  $s^*$  [Vogl et al., 1983; Abdollahi Pour, 2012] ou l'orbitale  $d$  [Jancu et al., 1998].

Une fois la base de travail choisie, on projette les deux côtés de l'équation 1.7 dans cette base :

$$\left\langle f_{m',b'}(\vec{r} - \vec{\tau}_{m'}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\tau}_{m'}} \middle| H \middle| \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \right\rangle = E \left\langle f_{m',b'}(\vec{r} - \vec{\tau}_{m'}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\tau}_{m'}} \middle| \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \right\rangle \quad (1.13)$$

Ce qui donne, en utilisant l'orthogonalité des orbitales de Löwdin :

$$\sum_b \sum_j \sum_m a_{n,b}(\vec{k}) H_{m,m'}^{b,b'}(\vec{R}_j + \vec{\tau}_m, \vec{\tau}_{m'}) = E_k a_{m',b'} \quad (1.14)$$

Où

$$H_{m,m'}^{b,b'}(\vec{R}_j + \vec{\tau}_m, \vec{\tau}_{m'}) = \left\langle f_{m',b'}(\vec{r} - \vec{\tau}_{m'}) \left| H \right| f_{m,b}(\vec{r} - \vec{R}_j - \vec{\tau}_m) \right\rangle e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_j + \vec{\tau}_m - \vec{\tau}_{m'})} \quad (1.15)$$

Le calcul de la structure de bande et des fonctions d'onde se fait alors par la diagonalisation de la matrice de l'équation 1.14 exprimée dans la base des orbitales de Löwdin.

La description au niveau atomique de la méthode ETBM se rapproche d'une méthode *ab initio* et permet une description précise des propriétés électro-optiques des SR, mais comporte certaines limites dans son utilisation.

Notamment, les éléments de matrices  $H_{m,m'}^{b,b'}$ , ne sont pas connus et sont donc obtenus en réalisant des ajustements pour obtenir une comparaison valable avec des résultats expérimentaux connus sur des matériaux massifs et sur des SR InAs/GaSb. Du fait de ces nombreux paramètres ajustables, la méthode ETBM est d'une utilisation assez délicate.

#### 1.3.2.1 Taille de la matrice

Il convient ici de remarquer que dans l'équation 1.14 les interactions entre tous les atomes de la structure sont prises en compte. L'approximation alors généralement utilisée est de prendre en compte uniquement les interactions des atomes avec leur plus proches voisins, car ces dernières diminuent avec la distance. Le plus souvent on considère qu'il n'y a interaction entre deux atomes que s'ils sont à côté l'un de l'autre.

De plus, on peut voir que la taille de la matrice à diagonaliser de l'équation 1.14 est directement proportionnelle au nombre d'atomes de la cellule élémentaire et à la taille totale de la structure.

Il faut alors encore rajouter les éléments de matrices qui introduisent le couplage spin-orbit  $H_{SL} = H + H_{SO}$ , où  $H$  est l'hamiltonien sans ce couplage et  $H_{SO}$  est la matrice contenant les termes de couplage spin-orbit. L'ajout de ces éléments double la taille de la matrice à diagonaliser mais est indispensable pour obtenir des résultats valables pour un SR InAs/GaSb.

Enfin les contraintes sont prises en compte en déplaçant les position  $\vec{\tau}_m$  des atomes de la cellule élémentaire en fonction de la différence de paramètre de maille des matériaux de la période du SR.

La taille de la matrice à diagonaliser (et donc la "lourdeur" et le temps du calcul numérique) est proportionnelle au niveau de précision que l'on souhaite (choix des orbitales, prise en compte du couplage spin-orbit) mais aussi de la taille de la structure modélisée. C'est pourquoi c'est une méthode qui peut devenir trop lourde pour faire des designs rapides pour des structures avec de grande épaisseur de période.

### 1.3.2.2 Choix de la période à modéliser

La description atomistique de la structure oblige à en connaître parfaitement la composition. Or, lors de sa réalisation, la structure SR InAs/GaSb peut présenter un certain nombre de défauts (ségrégation d'antimoine dans l'InAs notamment). De plus, les interfaces dans un SR peuvent être en InSb ou en GaAs et sont parfois forcées pour des raisons d'accord de maille, ce qui demande une bonne connaissance expérimentale des interfaces des structures modélisées. Je ne développerai pas plus ce problème. Des solutions ont été proposées dans le cas de l'ETBM et je renvoie le lecteur à l'article [Wei et Razeghi, 2004] pour plus de détails.

Cependant, une modélisation satisfaisante demande donc une connaissance précise des structures réalisées lors de la croissance et diminue donc l'universalité de l'utilisation de cette méthode pour rendre compte des propriétés de SR.

En conclusion l'ETBM est une méthode précise mais restreinte à des SR de période faible épaisseur et dont la composition est précisément connue. De plus, le lien entre les éléments d'entrée (les orbitales de Löwdin) et les sorties de la méthode est difficile à faire, il est donc parfois compliqué d'interpréter l'origine des résultats observés. Une autre méthode proche de l'ETBM a été proposée où les fonctions d'onde sont développées sur la base des orbitales liées [Chen, 2005]. Cette méthode très proche de l'ETBM a les mêmes avantages et inconvénients : une modélisation précise et complète des structures SR au prix d'un calcul "lourd" et qui demande une connaissance précise de la composition de la structure. Chen *et al* insiste d'ailleurs sur la forte influence des interfaces sur les résultats de modélisation. Cependant cette méthode permet de faire le lien plus facilement entre les paramètres de modélisation et les résultats et, contrairement à l'ETBM, permet de faire une analyse physique des résultats obtenus.

### 1.3.3 La méthode des pseudopotentiels empiriques

De la même manière que l'ETBM, la méthode des pseudopotentiels empiriques (EPM : Empirical Pseudopotential Method) est issue des travaux de Slater et Koster [Slater et Koster, 1954]. Allen [Allen, 1955] proposa ensuite une approche similaire aux travaux de Slater et Koster en utilisant le formalisme des ondes planes orthogonales de Herring [Herring, 1940]. Puis c'est dans les années 60 que Phillips et Kleinman [Phillips, 1958; Phillips et Kleinman, 1959; Kleinman et Phillips, 1960] développèrent et démocratisèrent l'EPM pour la résolution de l'équation de Schrödinger d'un électron se déplaçant dans un cristal.

Ainsi, les fonctions d'onde, qui sont exprimées sur une base d'ondes planes orthogonales, s'écrivent sous la forme :

$$\Psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} a_{n,\vec{G}}(\vec{k}) e^{i(\vec{k}+\vec{G})\cdot\vec{r}} \quad (1.16)$$

Avec  $\vec{G}$  un vecteur du réseau réciproque, i.e.  $\vec{G} = \frac{2\pi}{a}(n_x, n_y, n_z)$  où  $n_x$ ,  $n_y$  et  $n_z$  sont des entiers et  $a$  le paramètre de maille du cristal.

Le calcul est alors mené sur un certain nombre de vecteurs réciproques. Le compromis étant, comme à chaque fois dans cette troncature, de trouver l'équilibre entre

précision et taille de la matrice à diagonaliser. La projection dans cette base de l'équation de Schrödinger donne de manière directe :

$$\left( \frac{\hbar^2}{2m^*} |\vec{k} + \vec{G}|^2 + E_{\vec{k}} \right) a_{n,\vec{G}}(\vec{k}) + \sum_{\vec{G}'} V(\vec{G} - \vec{G}') a_{n,\vec{G}'}(\vec{k}) = 0 \quad (1.17)$$

Où

$$V(\vec{G} - \vec{G}') = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d^3\vec{r} e^{-i(\vec{G} - \vec{G}') \cdot \vec{r}} V(\vec{r}) \quad (1.18)$$

Ici  $\Omega$  est le volume de la cellule élémentaire.

Le pseudopotentiel  $V(\vec{r})$  est alors une superposition des potentiels de chaque atome :

$$V(\vec{r}) = \sum_j \sum_m v_m(\vec{r} - \vec{R}_j - \vec{\tau}_m) \quad (1.19)$$

où  $v_m$  est le pseudopotentiel atomique de l'atome  $m$  à la position  $\vec{\tau}_m$  dans la cellule élémentaire qui est à la position  $\vec{R}_j$ . Il suffit donc de connaître pour la structure considérée ces pseudopotentiels atomiques pour diagonaliser la matrice de l'équation 1.17 et obtenir structure de bande et fonctions d'onde. Cependant, les pseudopotentiels sont obtenus, de la même manière que les éléments de matrice de l'ETBM, de manière empirique en réalisant des comparaisons avec des résultats expérimentaux.

### 1.3.3.1 Limites de l'EPM

De la même manière que l'ETBM, l'EPM est une méthode atomistique et c'est, comme on peut le voir dans l'équation 1.19 l'écriture du pseudopotentiel qui va directement dépendre du nombre d'atome dans la structure et ainsi augmenter la taille de la matrice à diagonaliser.

De plus, pour obtenir une modélisation précise dans le cas des SR InAs/GaSb, il faut prendre en compte les interactions spin-orbit qui couplent les composantes haute et basse du spin et vont doubler la taille totale de la matrice. Le terme de couplage spin-orbit est le suivant d'après [Dente et Tilton, 1999] :

$$V^{\text{spin}}(\vec{G} - \vec{G}') = \frac{i\hbar^2}{4m^2c^2} \Gamma \langle S | \sigma | S' \rangle \cdot (\vec{G} - \vec{G}') \otimes (\vec{G}' + \vec{k}) V(\vec{G} - \vec{G}') \quad (1.20)$$

Où  $V(\vec{G} - \vec{G}')$  est le coefficient pseudopotentiel de l'équation 1.18.  $S$  et  $S'$  sont les orientations du spin,  $\sigma$  est un vecteur des matrices de spin de Pauli. Enfin,  $\Gamma$  est un facteur multiplicatif.

L'EPM est donc une méthode plutôt réservée à la modélisation de SR de faible taille de période. De plus, de la même manière que l'ETBM, la description atomistique de la structure demande l'intégration d'un grand nombre de détails de croissance (ségrégation, connaissance des interfaces) pour obtenir des résultats satisfaisant en

comparaison avec les expériences [Magri et Zunger, 2002].

Enfin dans le cas d'un matériau III-V massif, le nombre de paramètres à connaître est relativement faible. Les paramètres étant les pseudopotentiels atomiques  $v_m$  de l'équation 1.19. Or, dans le cas d'un SR InAs/GaSb, qui est un SR-SAC, ce nombre de paramètres devient beaucoup plus important du fait que la période comporte deux matériaux différents et aussi deux interfaces possibles. Ces paramètres nombreux ne sont pas connus expérimentalement et demandent un grand nombre de comparaison entre théorie et expérience pour les fixer [Magri et Zunger, 2002].

D'autres solutions ont été proposées pour adapter l'EPM à la modélisation des SR InAs/GaSb, avec de faibles et grandes épaisseurs de période. C'est la méthode des pseudopotentiels empiriques pour les superréseaux (SEPM : Superlattice Empirical Pseudopotential Method).

### 1.3.3.2 La méthode des pseudopotentiels empiriques pour les superréseaux

Dente et Tilton ont proposé au début des années 2000 une EPM plus adaptée à la modélisation des SR InAs/GaSb [Dente et Tilton, 1999; Dente et al., 2002]. La principale différence de la SEPM avec l'EPM atomistique (AEPM : Atomistic Empirical Pseudopotential Method) se trouve dans l'écriture du pseudopotentiel.

Dans la méthode de Dente et Tilton, on considère le cas d'un SR d'épaisseur de période  $D$ , dont la direction de croissance est  $[0, 0, 1]$ . L'épaisseur du puits est notée  $d$  et donc l'épaisseur de la barrière est  $(D-d)$ . On suppose que le matériau puits et le matériau barrière du SR sont en accord de maille. On suppose que les pseudopotentiels de chaque élément de la période sont le plus proches possible de ceux du matériau massif. Alors le potentiel prend la forme suivante :

$$V(\vec{r}) = \text{rect}\left(\frac{z}{d}\right) \sum_{\vec{G}} V_G^P e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}} + \left[1 - \text{rect}\left(\frac{z}{d}\right)\right] \cdot \sum_{\vec{G}} V_G^B e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}} \quad (1.21)$$

Les deux sommes sur  $\vec{G}$  sont les pseudopotentiels des matériaux barrière et puits massifs "infinis", où  $V_G^P$  et  $V_G^B$  sont les coefficients de pseudopotentiel des matériaux puits et barrière massifs respectivement.

La fonction périodique rectangle centrée en  $z = 0$  peut alors être écrite sous la forme d'une série de Fourier finie :

$$\text{rect}\left(\frac{z}{d}\right) = \sum_{n=-M}^M \frac{1}{n\pi} \sin\left(\frac{\pi d}{D} \cdot n\right) e^{i(2\pi n/D) \cdot z} \quad (1.22)$$

Le choix de la valeur de  $M$  va décider de la raideur de l'interface entre les deux matériaux. C'est un paramètre qui permettra de rendre compte de manière globale des défauts d'interface et non plus de manière détaillée (c'est-à-dire au niveau atomique) comme dans l'AEPM. Ensuite, le paramètre  $n$  permet de lisser les coefficients de Fourier les plus hauts. Dente et Tilton utilisent une valeur de  $M$  maximale de  $\frac{2D}{a}$ , ce qui correspond à une transition d'interface entre les deux matériaux inférieure à la monocouche. Cette approximation revient à dire que les matériaux de la structure se comportent comme les matériaux massifs et que les interfaces sont donc abruptes.



La figure 1.10 montre le potentiel du SR, les oscillations rapides du potentiel correspondent au potentiel atomique des atomes de chacun des matériaux. Dans le cas de l'EPM, on voit sur la figure 1.10 b un passage progressif du potentiel du matériau A au matériau B, alors que sur la 1.10 c, qui est le cas de la SEPM, l'interface est abrupte.

Le seul paramètre supplémentaire à introduire dans cette méthode est la valeur du désalignement des bandes des deux matériaux (le bandoffset). Les représentations des matériaux sont réduites à des représentations bulk et donc n'introduisent pas de nouveaux paramètres dans le cas d'un SR. De plus, dans cette méthode, les matériaux étant représentés comme des bulks, l'épaisseur de la période n'influe plus sur le temps de calcul. Dente et Tilton ont comparé leur modélisation à des résultats

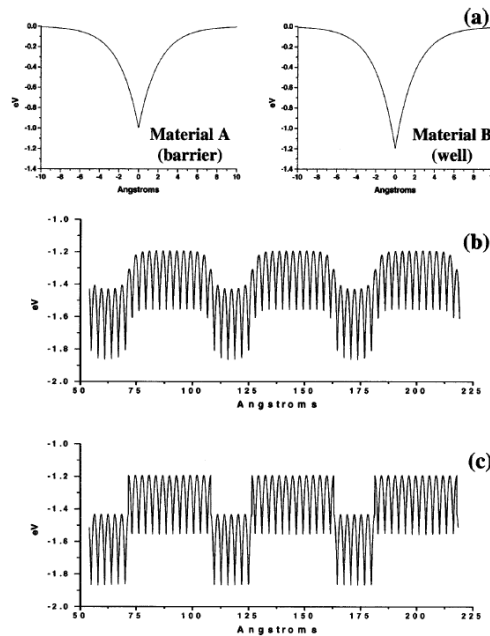


FIGURE 1.10: Comparaison des pseudopotentiels des méthodes AEPM et SEPM. (a) Potentiel atomique du matériau puits (A) et du matériau barrière (B). (b) pseudopotentiel d'un SR avec l'EPM atomistique. (c) pseudopotentiel d'un SR avec la SEPM. Figure issue de [Dente *et al.*, 2002]

expérimentaux de mesure d'énergie de bande interdite pris dans la littérature [Dente *et al.*, 2002]. Ils ont montré que leur modélisation était plus proche de ces résultats que d'autres modélisations issues de la littérature. Ils ont notamment comparé leurs résultats à ceux d'une méthode **kp** et de plusieurs méthodes AEPM.

#### 1.3.4 La méthode **kp** avec approximation de la fonction enveloppe

C'est la méthode la plus utilisée pour modéliser la structure de bande des semiconducteurs massifs et des hétérostructures (puits quantique, SR). A tel point qu'elle est appelée modèle standard [Wood et Zunger, 1996]. Pour les semiconducteurs massifs, la théorie **kp** a été très étudiée et a donné des résultats précis des structures de bande

et fonction d'onde ([Dresselhaus *et al.*, 1955], [Luttinger et Kohn, 1955], [Kane, 1956], [Kane, 1957], [Kane, 1966], [Luttinger, 1956], [Cardona et Pollak, 1966] et [Pollak et Cardona, 1966]). C'est donc logiquement la méthode qui a été utilisée en premier par la communauté scientifique pour la modélisation des SR et, de manière générale, pour la modélisation des hétérostructures pour lesquelles il est cependant nécessaire d'utiliser l'approximation de la fonction enveloppe [Bastard, 1988]. Pour la méthode **kp**, les fonctions d'onde sont exprimées sur une base de fonction de Bloch en centre de zone de Brillouin :

$$\Psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_b a_{n,b}(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_b(\vec{r}) \quad (1.23)$$

Les fonctions de Bloch ont la périodicité du cristal, i.e.  $u_b(\vec{r}) = u_b(\vec{r} + \vec{G})$  avec  $\vec{G} = n \frac{2\pi}{a}$  avec  $n$  un entier et  $a$  le paramètre de maille du cristal.

Il faut alors décider de la base de fonction de Bloch sur laquelle est réalisée le calcul, c'est-à-dire les bandes que l'on va prendre en compte. On cherche à obtenir la dispersion en énergie des bandes proches du gap : bande de conduction, bande de trous lourds et de trous légers ; c'est-à-dire les bandes qui jouent un rôle dans l'absorption des photons et le transport des photoporteurs créés. L'espace des bandes sur lequel est réalisé le calcul **kp** est l'ensemble des bandes qui interagissent avec les bandes proches du gap dont on veut obtenir la dispersion. Les modélisations **kp** que l'on trouve dans la littérature prennent classiquement 8 bandes en compte dans leur calcul : bande de conduction, bande de trous lourds et de trous légers et bande de spin-orbit (doublées par le spin).

On projette alors l'équation de Schrödinger 1.7 dans cette base de la manière suivante :

$$\left\langle u_{b'}^*(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \left| H \right| \Psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \right\rangle = E_n(\vec{k}) \left\langle u_{b'}^*(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \left| \Psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \right\rangle \quad (1.24)$$

Où le potentiel de notre SR vaut :

$$V_{SR}(\vec{r}) = V_c(\vec{r}, z) + V_{BO}(z) \quad (1.25)$$

$V_c(\vec{r}, z)$  est le potentiel qui a la périodicité du cristal dans lequel on se trouve dans la direction de croissance,  $z$ .  $V_{VB}(z)$  est le potentiel qui prend en compte le décalage d'énergie des bandes de valence des matériaux de la période. C'est notre élément de bandoffset. On fait alors l'approximation que la structure électronique des matériaux de la période est semblable à celle des matériaux massifs. Il s'agit donc d'un traitement de la structure comme un matériau massif et non de manière atomistique. En considérant que les fonctions de Bloch sont les mêmes dans les deux matériaux (A et B) de notre structure, on obtient la relation suivante :

$$H_{Bulk}^{A,B} u_b(\vec{k}) = E_b^{A,B} u_b(\vec{k}) \quad \text{avec} \quad H_{Bulk}^{A,B} = \frac{p^2}{2m} + V_c^{A,B}(\vec{r}) \quad (1.26)$$

Où  $E_b^{A,B}$  est le niveau d'énergie de la bande  $b$  du matériau bulk. En introduisant l'expression 1.23 de nos fonctions d'onde dans l'équation 1.24, on obtient :

$$\sum_b a_{n,b}(\vec{k}) \left\langle u_{b'}^*(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \left| H_{SL}(z) \right| u_b(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \right\rangle = \sum_b E_n(\vec{k}) a_{n,b}(\vec{k}) \left\langle u_{b'}^*(\vec{r}) \left| u_b(\vec{r}) \right\rangle \right.$$

(1.27)

En utilisant l'expression  $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{r}}$  du vecteur quantité de mouvement, on obtient :

$$\sum_b a_{n,b}(\vec{k}) \left\{ \langle u_{b'}^*(\vec{r}) | H_{bulk}(z) + V_{VB}(z) | u_b(\vec{r}) \rangle + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \langle u_{b'}^*(\vec{r}) | u_b(\vec{r}) \rangle + \frac{\hbar}{m^*} \vec{k} \langle u_{b'}^*(\vec{r}) | \vec{p} | u_b(\vec{r}) \rangle \right\} = \sum_b E_n(\vec{k}) a_{n,b}(\vec{k}) \langle u_{b'}^*(\vec{r}) | u_b(\vec{r}) \rangle \quad (1.28)$$

Du fait de la variation d'un matériau à l'autre dans la direction  $z$ , on a une dépendance en  $z$  de notre hamiltonien et de notre potentiel. On réalise alors l'approximation de la fonction enveloppe. C'est-à-dire qu'à l'échelle de la cellule élémentaire, seules les fonctions de Bloch varient. L'ensemble des autres membres de l'équation sont considérés comme constants à l'échelle de la cellule élémentaire. En utilisant cette approximation et l'orthogonalité de la base des fonctions de Bloch, ainsi que l'équation 1.26, on obtient l'expression finale de notre équation :

$$\sum_b a_{n,b}(\vec{k}) \left\{ \left[ \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m^*} + E_b(z) + V_{VB}(z) \right] \cdot \delta_{b,b'} + \frac{\hbar}{m^*} \vec{k} \cdot \vec{p} \right\} = E_n(\vec{k}) a_{n,b'}(\vec{k}) \quad (1.29)$$

Le dernier terme de la partie gauche de l'équation 1.29 est le terme **kp** d'où provient le nom de la méthode. Il ne reste ensuite plus qu'à diagonaliser l'équation 1.29 pour obtenir structure de bande et fonctions d'onde. Les matériaux étant traités comme des bulks, la taille de la matrice ne dépend pas de l'épaisseur de la période du SR simulé. Les paramètres empiriques nécessaires au calcul sont les niveaux d'énergie en centre de zone de Brillouin des matériaux massifs, leurs éléments de matrice d'interaction et le bandoffset entre les bandes de valence des matériaux. Ces paramètres sont dans l'ensemble relativement bien connus expérimentalement. De plus, le lien entre les paramètres en entrée du code et les résultats sont plus immédiats que dans l'ETBM pour laquelle les éléments d'entrée sont les orbitales de Löwdin. Il est de ce fait facile de donner des interprétations physiques aux résultats obtenus.

Nous pouvons voir que la méthode **kp** n'a donc pas les défauts des autres méthodes de modélisation (taille de la matrice, paramètres d'entrée peu ou pas connus). Cependant, dans le cas des SR InAs/GaSb le modèle standard est un peu moins précis tend par exemple à systématiquement surestimer les énergies des bandes interdites de 10 à 15% [Dente *et al.*, 2002], pour les SR d'épaisseur de période inférieure à 15 MC.

Pour comprendre le manque de précision de la méthode **kp** notamment dans la modélisation des énergies de bande interdite dans le cas des SR InAs/GaSb, il faut s'intéresser aux particularités de cette structure comparées aux autres SR.

#### 1.3.4.1 Les limites de la méthode **kp** pour la modélisation des SR InAs/GaSb

Premièrement, le SR InAs/GaSb est un SR-SAC, or la modélisation **kp**, du fait de son traitement des matériaux à un niveau massif et non atomistique, suppose les

matériaux juxtaposés dans la période, c'est-à-dire que ce qui se passe à un niveau atomique aux interfaces n'est pas pris en compte. L'apparition de l'InSb ou du GaAs aux interfaces n'est donc pas prise en compte.

De plus, les SR-AC ont toujours les mêmes interfaces et sont donc du groupe ponctuel de symétrie  $D_{2d}$ . Pour un SR-SAC InAs/GaSb, les interfaces peuvent être alternativement en GaAs et en InSb, ceci diminue la symétrie de la structure qui passe dans le groupe ponctuel de symétrie  $C_{2v}$ . Ce changement de groupe de symétrie fait apparaître des effets tel qu'une anisotropie de polarisation dans le plan [Krebs et Voisin, 1996] ou encore des changements dans les règles de sélection des transitions [Kwok *et al.*, 1992]. Ces effets ne sont pas modélisés par la méthode **kp** [Piquini *et al.*, 2008].

Il est donc important de connaître la structure que l'on modélise et le contrôle (ou non) de ses interfaces pour espérer obtenir une modélisation fiable de ses caractéristiques optoélectroniques.

Deuxièmement, la structure SR présente un alignement de type III, le haut de la bande de valence du GaSb est au-dessus du bas de la bande de conduction de l'InAs (figure 1.12). Or, la méthode **kp** est un calcul réalisé sur un sous-espace de bande. Comme précisé précédemment, les modélisations **kp** que l'on trouve dans la littérature prennent en compte classiquement 8 bandes dans leur calcul : bande de conduction, bande de trous lourds et de trous légers et bande de spin-orbit (doublées par le spin).

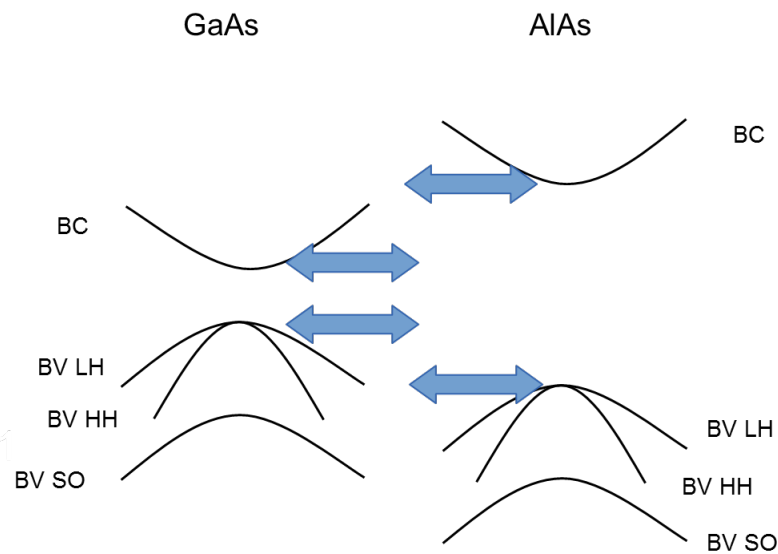


FIGURE 1.11: Schéma des structures de bandes des matériaux d'un SR AlAs/GaAs, ainsi que les interactions entre les bandes des deux matériaux

Ce choix convient dans le cas de structures superréseaux de type I, tel que AlAs/-GaAs. En effet, comme on le voit sur la figure 1.11, seul les bandes proches du gap de l'AlAs sont en interaction avec les bandes proches du gap du GaAs, et inversement. Au contraire, dans le cas d'un SR InAs/GaSb, l'alignement étant de type III, il y a un fort décalage entre les bandes des deux matériaux. Sur la figure

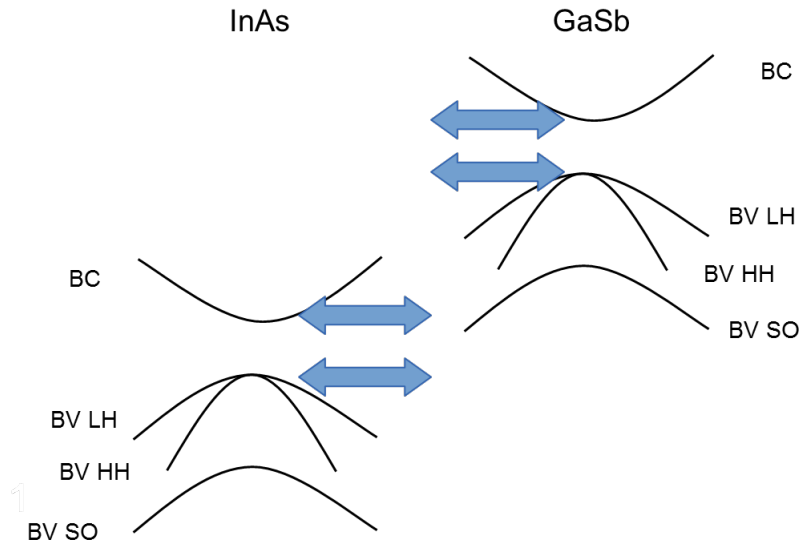


FIGURE 1.12: Schéma des structures de bandes des matériaux d'un SR InAs/GaSb, ainsi que les interactions entre les bandes des deux matériaux

1.12, il apparaît que des bandes de valence du GaSb interagissent avec les bandes proches du gap de l'InAs. A l'opposé, des bandes de conduction hautes en énergie de l'InAs sont en interaction avec les bandes proches du gap du GaSb.

C'est pourquoi, pour cette structure de SR, le choix du sous-espace des bandes dans lequel est réalisé le calcul **kp** est très important pour éviter de négliger des interactions entre les matériaux et avoir une modélisation réaliste du SR InAs/GaSb.

Différentes solutions ont été proposées pour adapter le modèle standard à la modélisation des SR InAs/GaSb. Je vais donc présenter les principales méthodes **kp** utilisées dans la littérature qui ont réussi à obtenir des résultats satisfaisants en comparaison avec des mesures expérimentales.

#### 1.3.5 Au delà de la méthode *kp* standard

Toutes ces solutions reposent sur une prise en compte des interfaces par différents traitements. En effet, comme il a été introduit précédemment, le SR InAs/GaSb est sans atome commun ce qui entraîne des interfaces particulières qui peuvent avoir une influence sur les propriétés du SR. Aussi, plus l'épaisseur de la période est faible, plus les effets d'interface risquent d'être importants, du fait de leur nombre élevé dans la structure comparé aux épaisseurs des matériaux de la période.

- Prise en compte du quaternaire aux interfaces

[Hong *et al.*, 2009] a déterminé avec précision la composition réelle de la période de leur SR InAs/GaSb et notamment de ses interfaces. Ils ont effectué des mesures par microscopie à effet tunnel et par microscopie électronique à transmission. Ces mesures ont montré que le désordre d'interface était dû à deux raisons :

- les rugosités d'interface lors de la croissance du SR.

- la diffusion des matériaux aux interfaces. L'InAs et le GaSb se mélangeant légèrement à proximité des interfaces.

De ces observations, ils déduisent la présence d'interfaces graduelles et non abruptes, d'une épaisseur allant de 2 à 6 MC et de la ségrégation d'antimoine dans l'InAs. La méthode de calcul utilisée est un code **kp** classique de 8 bandes, pour lequel le potentiel du SR n'est plus composé d'interfaces abruptes mais d'interfaces graduelles. Ces dernières sont simulés par un matériau quaternaire  $(\text{InAs})_x(\text{GaSb})_{1-x}$  où la variable  $x$  évolue linéairement de 1 à 0, comme le montre la figure 1.13.

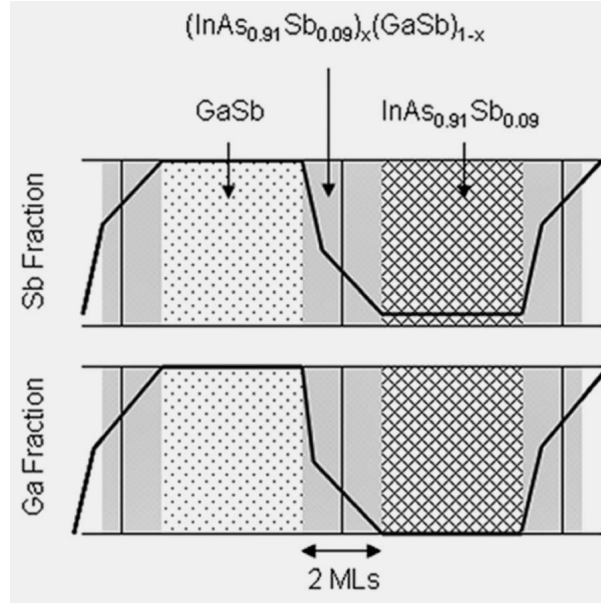


FIGURE 1.13: Schéma du potentiel du SR  $\text{InAs}_{0.91}\text{Sb}_{0.09}/\text{GaSb}$  avec des interfaces progressives. Figure issue de [Hong *et al.*, 2009]

Ils comparent les longueurs d'onde de coupure calculées pour des SR de faible épaisseur de période avec des données expérimentales issues de leurs échantillons et de la littérature. Ces échantillons (de faible épaisseur de période) sont hors du domaine de validité classique de la méthode **kp**. Leurs calculs, en prenant des interfaces abruptes, surestiment les gaps comme attendu de 5 à 10% pour des SR de 20 à 10 MC d'épaisseur de période et l'écart ne fait ensuite qu'augmenter pour des épaisseurs de période inférieures. Cependant, en intégrant la composition réelle de la période du SR, ils obtiennent des résultats en accord avec les résultats expérimentaux.

Bien que cette méthode donne des résultats de modélisation semblable à leurs mesures d'énergie de bande interdite, elle demande une connaissance poussée des échantillons réalisés et de leur méthode de croissance ; elle reste donc peu exportable sans connaissance précise de la composition des interfaces. Le principal intérêt de ce travail était d'apporter une démonstration que la méthode **kp** peut être utilisée pour des SR de période de faible épaisseur.

- Ajout d'un potentiel d'interface

Pour prendre en compte de l'effet des interfaces dans les SR InAs/GaSb de faible épaisseur, il a été proposé d'ajouter un potentiel aux interfaces qui simulerait leurs effets [Szmulowicz *et al.*, 2004; Rodriguez, 2005]. Le potentiel d'interface est pris de la forme :

$$V = H_{XY} a_0 \delta(z - z_i) \Theta \quad (1.30)$$

où les couplages entre bandes à l'interface sont introduits par la matrice  $\Theta$ .  $a_0$  est le paramètre de maille (celui du substrat),  $\delta(z - z_i)$  est la fonction dirac avec  $z_i$  la position de l'interface et  $H_{XY}$  est l'amplitude du potentiel d'interface. On a alors, dans lors de la résolution de l'équation de Schrödinger, un effet localisé aux interfaces, du fait de la fonction dirac  $\delta(z - z_i)$ .

Enfin, le terme  $H_{XY}$  qui définit l'amplitude du potentiel d'interface est souvent défini ainsi :

$$H_{XY} = \frac{\hbar^2 t}{2m_0 a_0} \quad (1.31)$$

Où  $t$  est un paramètre de couplage (sans dimension) ajustable. Cependant, sous cette forme, il est difficile d'interpréter physiquement ce paramètre de couplage  $t$ .

- Dérivation des termes d'interface

De la même manière que les méthodes précédentes, cette solution propose de prendre en compte les interfaces, cette fois-ci par une méthode classique **kp** 8 bandes avec des transitions abruptes d'un matériau à l'autre mais en appliquant un traitement perturbatif du potentiel du SR [Klipstein, 2010] composé de deux matériaux A et B. Le potentiel du SR est exprimé comme la somme du potentiel d'un cristal de référence et d'un terme perturbatif,  $V_{SR} = V + \delta V$ . Le terme constant étant fixe, c'est un niveau choisi arbitrairement égal à une moyenne du potentiel des deux matériaux ou encore au potentiel d'un des deux matériaux de la période. Le choix simplifiant les notations est de le prendre égal à un des deux matériaux, dans notre cas le matériau A.

Comme pour la méthode **kp** classique, le calcul part de la résolution de l'équation de Schrödinger (équation 1.7) et fait l'approximation de la fonction enveloppe. En utilisant cette expression du potentiel dans l'équation 1.7 on obtient une nouvelle expression de l'Hamiltonien dans l'espace réciproque :

$$\begin{aligned} E\psi_n(\vec{k}) = & \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + E_n \right) \psi_n(\vec{k}) + \sum_{n'} \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}_{nn'} \psi_{n'}(\vec{k}) \\ & + \sum_{n'} \sum_{z_i} \int \left[ G(k_z - k'_z) \delta U_{nn'} + \frac{\pi_i e^{-i(k_z - k'_z)z_i}}{2\pi} \right. \\ & \left. \times (D_{0,nn'} + (k_z - k'_z) D_{1,nn'} + \dots) \right] \times \delta(\vec{k}_{||} - \vec{k}'_{||}) \psi_{n'}(\vec{k}'_{||}) d^3 k' \quad (1.32) \end{aligned}$$



Où  $\pi_i = +1$  pour une interface où le matériau B est sur le matériau A et  $\pi_i = -1$  dans le cas contraire quand le matériau A est sur le matériau B. Le potentiel  $V$  est exprimé sous la forme suivante :  $\delta V(\vec{r}) = \delta U(\vec{r})G(z)$ , où la direction de croissance est la direction  $z$ .  $\delta U_{nn'} = \langle u_n | \delta U | u_{n'} \rangle$  représente le potentiel volumique et les interfaces sont prises en compte par la fonction  $G(z)$ , ces dernières sont localisées aux points  $(x, y, z_i)$ . La fonction  $G(z)$  est une fonction marche qui définit la raideur de l'interface : elle est égale à 0 dans le matériau A (qui a été défini comme le cristal de référence) et à 1 dans le matériau B. L'expression et le développement des termes  $D_{l,nn'}$  se trouve dans la référence [Klipstein, 2010]. L'auteur montre que le développement jusqu'aux termes  $D_{0,nn'}$  et  $D_{1,nn'}$  est suffisant pour modéliser les SR InAs/GaSb.

On reconnaît à la première ligne de l'équation 1.32 l'expression classique de l'hamiltonien  $\mathbf{k}\mathbf{p}$ . Les termes suivants sont des termes d'interfaces introduits par le traitement perturbatif du potentiel. L'expression finale de l'hamiltonien de cette méthode s'écrit sous la forme  $H_{SR} = H_{\mathbf{k}\mathbf{p}} + H_{\text{interfaces}} + H_{\text{contraintes}}$ . L'hamiltonien  $H_{\mathbf{k}\mathbf{p}}$  est un hamiltonien  $\mathbf{k}\mathbf{p}$  de type Burt-Foreman sur 8 bandes, développé spécialement pour la modélisation des hétérostructures [Foreman, 1993]. L'hamiltonien  $H_{\text{contraintes}}$  intègre la prise en compte des contraintes de la manière classique développé par [Bir et al., 1974]. Enfin, le terme qui nous intéresse ici est l'hamiltonien dû aux interfaces exprimé sur la base  $(S, X, Y, Z : 4 \times 4$  multiplié par 2 pour le spin) bandes de cette méthode  $\mathbf{k}\mathbf{p}$  :

$$H_{\text{interfaces}} = \sum_i \delta(z - z_i) \begin{bmatrix} D_S & 0 & 0 & \pi_i \beta \\ 0 & D_X & \pi_i \alpha & 0 \\ 0 & \pi_i \alpha & D_X & 0 \\ \pi_i \beta & 0 & 0 & D_Z \end{bmatrix} \quad (1.33)$$

Où  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $D$  sont les paramètres d'interfaces. Cette matrice n'agit qu'aux interfaces du fait de la fonction  $\delta(z - z_i)$ . Ces paramètres d'interfaces dépendent des matériaux choisis et de l'empilement du SR et permettent de faire apparaître des couplages entre bandes aux niveaux des interfaces qui n'apparaissent pas dans la méthode  $\mathbf{k}\mathbf{p}$  standard.

Cette méthode a donné de très bons résultats dans des modélisations de caractéristiques simples du SR tel que la longueur d'onde de coupure ainsi que dans des caractéristiques plus avancées comme le coefficient d'absorption [Livneh et al., 2012]. Les paramètres d'interfaces sont obtenus par ajustement pour que les résultats théoriques correspondent à des mesures expérimentales. Ce travail de choix des paramètres d'interface a été réalisé en effectuant une comparaison sur les longueurs d'onde de coupure et les spectres d'absorption d'un grand nombre d'échantillons. En conclusion, ces paramètres ont un fondement physique (contrairement à la méthode du potentiel d'interface) et ont été déterminés par une comparaison avec des mesures expérimentales. Ce qui en fait une méthode intéressante pour prendre en compte les interfaces.



### 1.3.6 Conclusion sur l'état de l'art

Le tableau 1.4 résume les différentes méthodes utilisées pour modéliser les structures SR InAs/GaSb, ainsi que leurs avantages et inconvénients.

TABLE 1.4: Résumé des avantages et inconvénients des différentes méthodes de la littérature utilisées pour la modélisation des SR InAs/GaSb

Méthode	Avantages	Inconvénients
ETBM	Une modélisation atomistique, et donc précise, des interfaces.	Une taille de matrice qui dépend de l'épaisseur de la structure SR. Difficulté d'interprétation de l'origine des résultats. Paramètres empiriques des orbitales à déterminer.
AEPM	Une modélisation atomistique, et donc précise, des interfaces.	Une taille de matrice qui dépend de l'épaisseur de la structure SR. Paramètres empiriques des potentiels à déterminer
SEPM	Peu de paramètres en entrée.  Une taille de matrice qui ne dépend pas de l'épaisseur de la structure SR.	Des approximations sur la structure modélisée : les matériaux sont considérés comme massifs.  Les interfaces sont mal représentées.
<b>kp</b> adapté au SR InAs/GaSb	Peu de paramètres en entrée.  Une taille de matrice qui ne dépend pas de l'épaisseur de la structure SR.	Des approximations sur la structure modélisée : les matériaux sont considérés comme massifs.  La prise en compte des interfaces introduit des nouveaux paramètres ajustables.

L'objectif de ce travail est de réaliser un code de modélisation qui permettra de proposer de nouvelles structure de SR InAs/GaSb optimisées pour la détection infrarouge. De plus, ce code servira à comprendre les phénomènes physiques mis en jeu au travers de la modélisation de figures de mérites, tel que l'énergie de bande interdite, l'absorption, les masse effectives ou encore la concentration de porteurs intrinsèques, de SR InAs/GaSb d'épaisseur de période très différentes. Il doit donc être suffisamment rapide pour tester un grand nombre de structures dans un temps raisonnable. Aussi, un code atomistique n'est pas adapté à notre besoin, car ce modèle ne simule que des SR de faible épaisseur de période et nécessite un temps

de calcul important.

Il reste donc deux méthodes possibles : la SEPM ou une méthode **kp** qui sont plus rapide car elles utilisent des modèles de matériaux massifs. Notre choix s'est orienté vers la méthode **kp** sur laquelle il existait une expertise au sein de notre laboratoire avec la possibilité de prendre en compte les interfaces avec la méthode de Klipstein.

#### 1.4 CONCLUSION ET OBJECTIFS DE LA THÈSE

Au cours de ce chapitre, j'ai introduit de manière très générale la détection IR et j'ai par la suite présenté les besoins actuels de ce domaine. Le détecteur SR InAs/GaSb est un candidat émergent sérieux pour répondre à ces besoins.

Le SR InAs/GaSb présente différents avantages comme une énergie de bande interdite accordable, fonction de deux paramètres : l'épaisseur de la période et le ratio d'épaisseur d'InAs et de GaSb dans la période. De plus, le SR InAs/GaSb a théoriquement un taux de recombinaison Auger plus faible que les autres détecteurs IR et présente une masse effective élevée, permettant une diminution du courant tunnel pour les structures à faible énergie de bande interdite. Enfin, la croissance des matériaux III-V est bien maîtrisée ce qui est un avantage pour la réalisation de matrices grand format.

L'état de l'art a montré que les résultats actuels du SR InAs/GaSb ne sont pas à la hauteur des attentes et des possibilités théoriques. C'est pourquoi de nombreux groupes se sont penchés sur la modélisation de ces structures pour mieux les comprendre et en repousser les limites. Cependant, du fait de son alignement de type III et des faibles épaisseurs de période, le SR InAs/GaSb ne peut être précisément modélisé par la méthode classique habituellement utilisée pour les semiconducteurs qui est la méthode **kp**. Plusieurs solutions ont alors été proposées pour répondre à ce problème :

- Des modélisations dites atomistiques (tight-binding, SEPM), précises mais dont le temps de calcul dépend de la taille de la période.
- Des méthodes **kp** qui ont été adaptées à la modélisation des SR par la prise en compte des interfaces. Ces méthodes sont précises et ne dépendent pas de la taille de la période, néanmoins, elles introduisent de nouveaux paramètres ajustables.

Cette thèse a pour objectif de réaliser un outil de modélisation précis, exempt de paramètres ajustables et qui puisse rapidement donner des résultats pour des SR InAs/GaSb de différentes épaisseurs.

Je propose alors une modélisation **kp** avec approximation de la fonction enveloppe développée sur une base de 18 bandes, au lieu des 8 bandes habituellement utilisées dans la littérature : 6 bandes de valence  $\Gamma_7$ - $\Gamma_8$  (trous lourds, trous légers, spin-orbit), 2 bandes de conduction  $\Gamma_6$ , 6 bandes de conduction plus hautes en énergies  $\Gamma_7$ - $\Gamma_8$  et 4

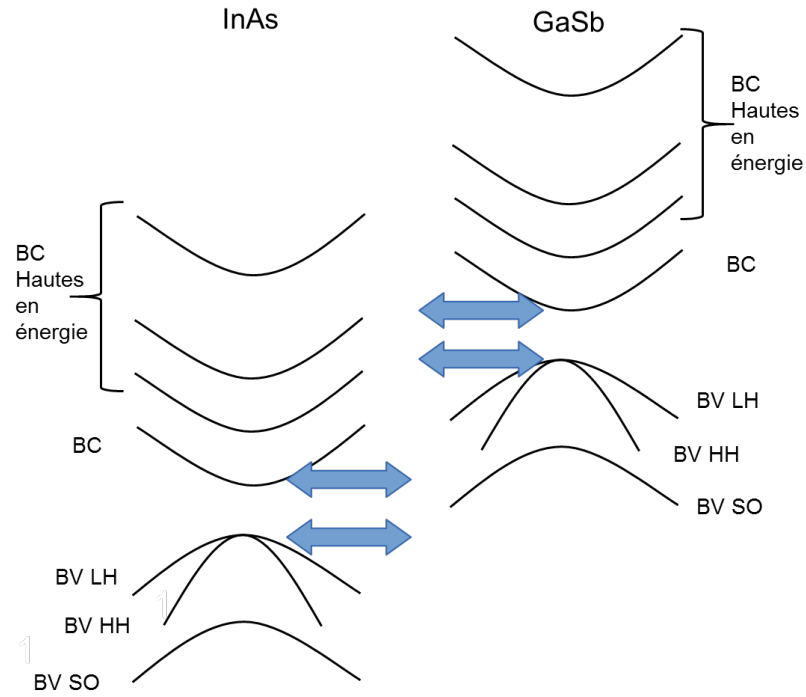


FIGURE 1.14: Schéma des structures de bandes des matériaux d'un SR InAs/GaSb, ainsi que les interactions entre les bandes des deux matériaux

bandes de conduction très hautes en énergie  $\Gamma_3$ . Comparé au modèle **kp** conventionnel à 14 bandes [Peter et Cardona, 2010] nous avons ajouté les interactions couplant les bandes de valence et les bandes de conduction hautes en énergie  $\Gamma_3$ . C'est un modèle qui a déjà été utilisé pour la modélisation des effets Auger dans les SR InAs/GaSb [Vinter, 2002]. Il est probable que le manque de précision des modélisations **kp** actuelles vienne de l'alignement de type III des SR InAs/GaSb. En prenant en compte des bandes de conduction plus hautes en énergie dans notre modélisation, nous ne devrions négliger aucune des interactions entre l'InAs et le GaSb importantes afin d'obtenir une modélisation précise de la structure SR (figure 1.14).

De manière plus large, l'objectif de ce travail sera de développer des modélisations fiables des propriétés optiques de SR InAs/GaSb pour en comprendre le fonctionnement et les limites actuelles des détecteurs développés par l'IES. A plus long terme, ce code servira à proposer de nouveaux designs pour les futurs détecteurs opérant dans le LWIR.

## MODÉLISATION DES PROPRIÉTÉS OPTIQUES DES SUPERRÉSEAUX INAS/GASB

---

Dans un premier temps, les structures SR utilisées pour cette comparaison seront présentées en détails et avec leur particularités. Ces structures nous accompagneront jusqu'à la fin du manuscrit et les sorties du code seront toujours présentées pour ces trois structures et comparées à des données expérimentales.

Ensuite, je présenterai la même analyse pour l'énergie de bande interdite et le coefficient d'absorption.

1. je présenterai les modèles utilisés pour calculer ces grandeurs physiques.
2. je présenterai les différents paramètres matériaux en entrée du code qui ont une influence sur les résultats de ces calculs.
3. je présenterai les mesures expérimentales et une comparaison avec les sorties du code. Les mesures de photoluminescence (PL) ont été faites par l'IES et j'ai réalisé les mesures de coefficient d'absorption.

Je terminerai ce chapitre en présentant les choix faits dans la modélisation pour obtenir une comparaison satisfaisante.

### 2.1 PRÉSENTATION DES STRUCTURES ÉTUDIÉES

Lors de la présentation des structures SR pour la détection infrarouge, j'ai parlé d'une de leur principale caractéristique qui est leur grande flexibilité. Cette flexibilité permet de choisir l'énergie de bande interdite en jouant sur l'épaisseur de la période et plus particulièrement en jouant sur l'épaisseur respectives d'InAs et de GaSb dans la période. Aussi, il est intéressant d'introduire ici le rapport  $R$  qui est égal à l'épaisseur d'InAs divisée par l'épaisseur de GaSb par période de SR : avec différents rapports  $R$ , il est possible d'atteindre une même longueur d'onde de coupure. L'étude présentée ici se faisant dans le MWIR, je m'intéresserai à des SR dont la longueur d'onde de coupure se situe autour de  $5\text{ }\mu\text{m}$  à 80K et plus particulièrement aux trois structures de SR représentées schématiquement sur la figure 2.1. Ces structures sont appelées :

- InAs-rich quand l'épaisseur de la couche d'InAs est prépondérante dans la période du SR
- GaSb-rich dans la cas inverse avec une couche de GaSb plus épaisse que celle d'InAs
- symétrique dans le cas où les épaisseurs de GaSb et d'InAs sont identiques.

La figure 2.1 présente les trois structures étudiées au cours de ce manuscrit, ainsi que la valeur pour leur rapport R.

Ces structures ont été utilisées pour réaliser des détecteurs SR de structure pin. Ces différentes photodiodes ont été particulièrement étudiées par l'IES et l'ONERA d'un point de vue expérimental (mesure de rendement quantique, de courant d'obscurité, de réponse spectrale et de bruit) [Delmas *et al.*, 2014; Giard *et al.*, 2014a,b]. Ce travail se propose donc d'étudier ces trois structures d'un point de vue théorique.

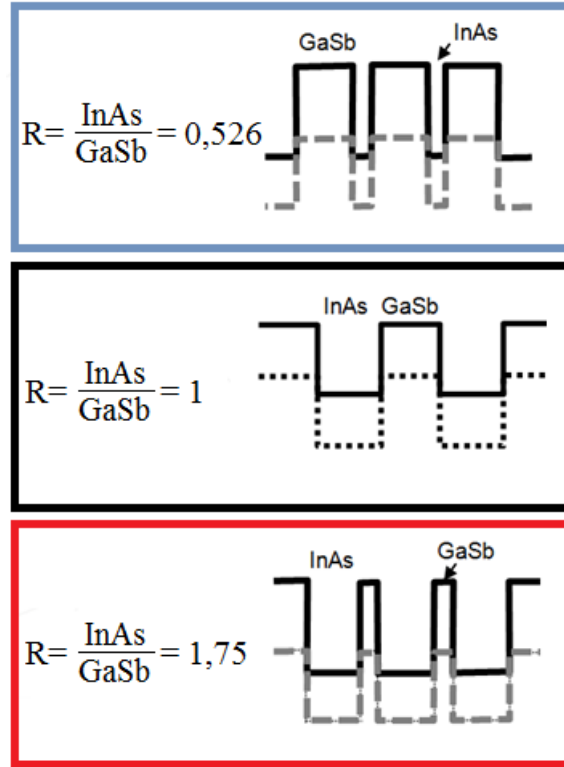


FIGURE 2.1: Représentation schématique des trois structures SR étudiées (de haut en bas) : GaSb-rich (10MC d'InAs/19MC de GaSb,  $R = 0,526$ ), symétrique (10MC d'InAs/10MC de GaSb,  $R = 1$ ) et InAs-rich (7MC d'InAs/4MC de GaSb,  $R = 1,75$ ).

Nous allons voir dans les paragraphes qui suivent comment le choix du ratio R influence le recouvrement des fonctions d'onde et la densité d'états.

#### 2.1.1 Le recouvrement des fonctions d'onde

Le calcul du recouvrement de la probabilité de présence des électrons et des trous permet de rendre compte de la capacité de la structure à absorber un photon incident et à créer une paire électron-trou. Or ce paramètre va fortement varier d'un SR InAs-rich à un SR GaSb-rich. En effet, la faible épaisseur des matériaux dans le cas du SR InAs-rich permet un fort couplage entre les différents puits, ceci entraîne, comme expliqué au chapitre 1, l'apparition de minibandes. Les fonctions d'onde des électrons sont alors fortement délocalisées et les électrons ont une probabilité de présence sur l'ensemble de la structure. La probabilité de présence non nulle des trous

permet alors d'avoir un fort recouvrement (figure 2.2).

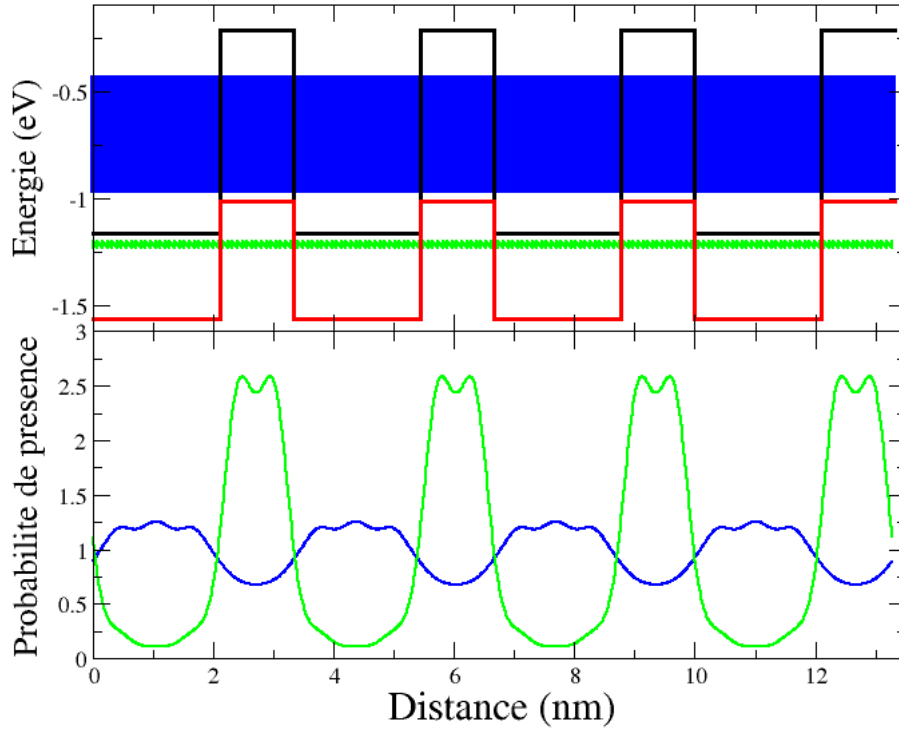


FIGURE 2.2: Première minibande de conduction ( $E_1$ , en bleu) et première minibande de valence (trous lourds  $HH_1$ , en vert) d'un SR InAs-rich (7MC InAs / 4MC GaSb) dans le MWIR et probabilité de présence des niveaux d'énergies fondamentaux en  $k = 0$ , calculés avec mon code.

A l'inverse dans un SR GaSb-rich le couplage étant beaucoup plus faible (on se rapproche progressivement d'un matériau de type multi-puits quantique) et du fait de l'alignement de type III du SR InAs/GaSb, les électrons se trouvent fortement localisés dans le matériau puits, l'InAs, et les trous dans le matériau barrière, le GaSb. Le recouvrement est alors fortement diminué (figure 2.3). De plus, dans le cas du SR GaSb-rich le couplage est tellement faible entre les différents puits qu'il est inexact de parler de minibande. En effet, comme on peut le voir sur la figure 2.3, la probabilité de présence des électrons dans le GaSb est quasi nulle, la structure de bande est alors constituée de niveaux quasi-dcrets ou dit autrement, de minibandes très fines.

Il est alors possible d'obtenir une valeur pour le recouvrement de la fonction d'onde d'électron  $\Psi_c$  et de trou  $\Psi_v$ , en calculant  $|\langle \Psi_c | \Psi_v \rangle|^2$ . Nous pouvons voir ainsi que d'un matériau à l'autre le recouvrement entre la première fonction d'onde de trou et la première fonction d'onde d'électron passe de 77% pour un SR InAs-rich à 31% pour un SR GaSb-rich. Le SR symétrique ayant logiquement une valeur intermé-

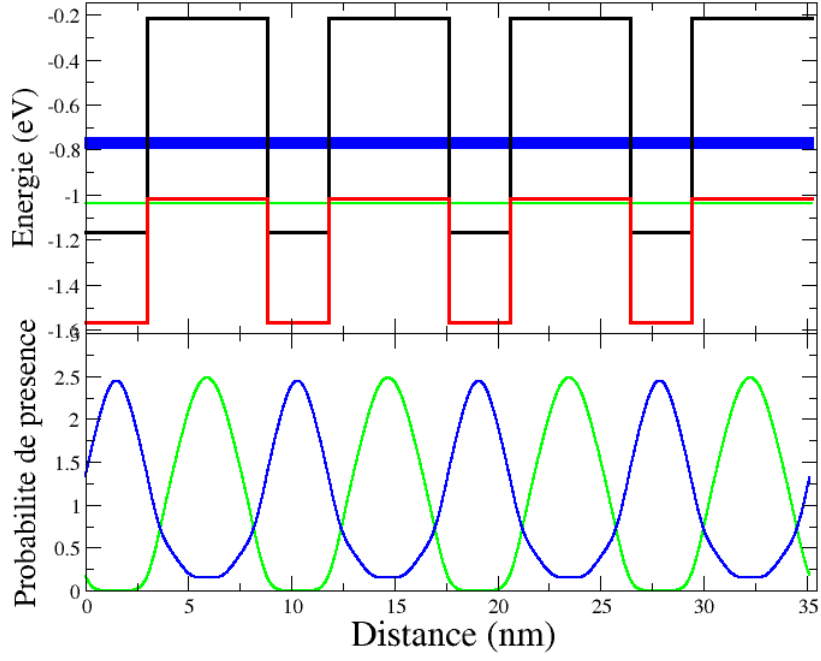


FIGURE 2.3: Première minibande de conduction ( $E_1$ , en bleu) et premier niveau discret de valence (trous lourds  $HH_1$ , en vert) d'un SR GaSb-rich (10MC InAs / 19MC GaSb) dans le MWIR et probabilité de présence des niveaux d'énergies fondamentaux.

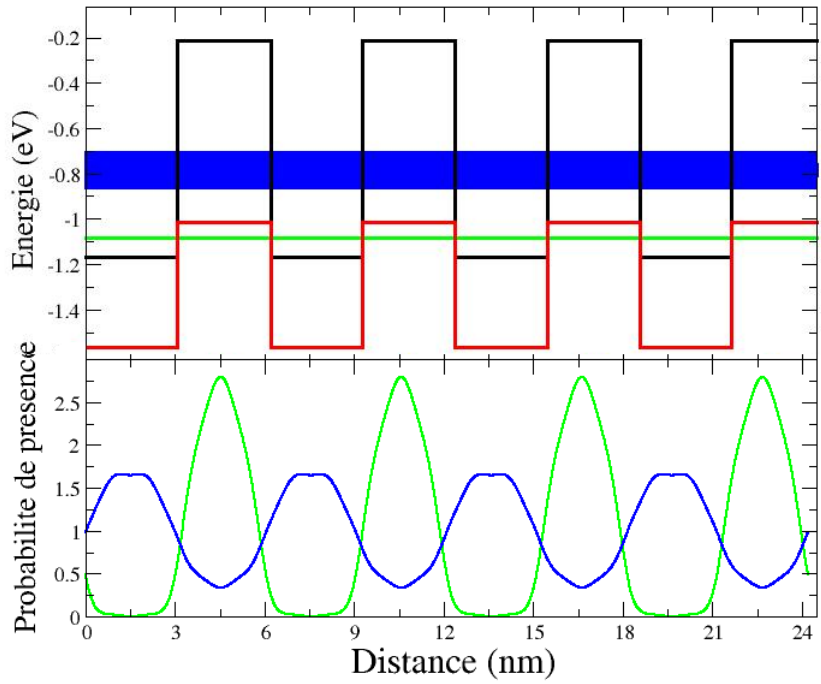


FIGURE 2.4: Première minibande de conduction ( $E_1$ , en bleu) et première minibande de valence (trous lourds  $HH_1$ , en vert) d'un SR symétrique (10MC InAs / 10MC GaSb) dans le MWIR et probabilité de présence des niveaux d'énergies fondamentaux.

diaire de 50% (figure 2.4). Ce paramètre a une influence directe sur l'absorption de la structure.

### 2.1.2 Densité d'états du Superréseau

La densité d'états quantifie le nombre d'états électroniques dans la bande de conduction ou de valence pour une énergie  $E$  donnée. C'est une grandeur physique qui dépend immédiatement de la structure de bande du matériau et qui est directement liée à tout mécanisme impliquant une transition entre les bandes.

Pour un semiconducteur tridimensionnel (3D), isotrope et proche de l'énergie de bande interdite cette densité évolue en racine carré de l'énergie :

$$\rho_{c,v}(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left( \frac{2m_{c,v}^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{(E - E_0)} \quad (2.1)$$

Où  $\rho_c$  désigne la densité dans les bandes de conduction et  $\rho_v$  désigne la densité dans les bandes de valence.  $m_c^*$  est la masse des électrons et  $m_v^*$  est la masse des trous,  $V$  le volume du matériau et  $E_0$  l'énergie de bande interdite.

Dans le cas du puits quantique, qui est une structure bidimensionnelle (2D), présentant  $n$  niveaux d'énergie discrets, la densité d'état se présente sous la forme d'un escalier dont la hauteur des marches est une constante du matériau mais dont la position des marches dépend de la position du niveau d'énergie discret  $E_n$  :

$$\rho_{c,v}(E) = \frac{S \cdot m_{c,v}^*}{\pi \hbar^2} \sum_n \theta(E - E_n) \quad (2.2)$$

où  $\theta(x)$  est la fonction Heaviside et  $S$  la surface du matériau.

Le SR lui va avoir un comportement intermédiaire entre ces deux types de comportements du fait de sa nature d'empilement de puits couplés. Sa densité d'états pour une minibande  $E^n$  comprise entre les énergies  $E_{min}^n$  et  $E_{max}^n$  peut être approximée par la relation [Bastard, 1988] :

$$\rho_{c,v}^{SR}(E) = \frac{S \cdot m_{c,v}^*}{\pi \hbar^2} f(E) \text{ où } f(E) = \begin{cases} 0 & \text{si } E < E_{min}^n \\ \arccos\left(\frac{E - E_n}{2t_n}\right) & \text{si } \left|\frac{E - E_n}{2t_n}\right| < 1 \\ 1 & \text{si } E > E_{max}^n \end{cases} \quad (2.3)$$

où  $2t_n$  est l'épaisseur énergétique de la minibande ( $E_{max}^n - E_{min}^n$ ).

Sur la figure 2.5 sont représentées schématiquement les densités d'états d'un matériau massif (3D), d'un SR et d'un puits quantique. On voit alors bien le comportement intermédiaire du SR qui selon le couplage plus ou moins important entre ses puits quantiques présentera un comportement 3D, c'est le cas du fort couplage de l'InAs-rich, ou un comportement plutôt 2D, c'est le cas du faible couplage du GaSb-rich.

Le coefficient d'absorption est directement proportionnel à la densité d'état joints, qui est la densité d'états qui sont joints à un vecteur  $\vec{k}$  donné par l'énergie d'un photon. On retrouvera donc cette différence de comportement dans les courbes d'absorption de ces structures SR et il sera plus intéressant de faire la comparaison entre



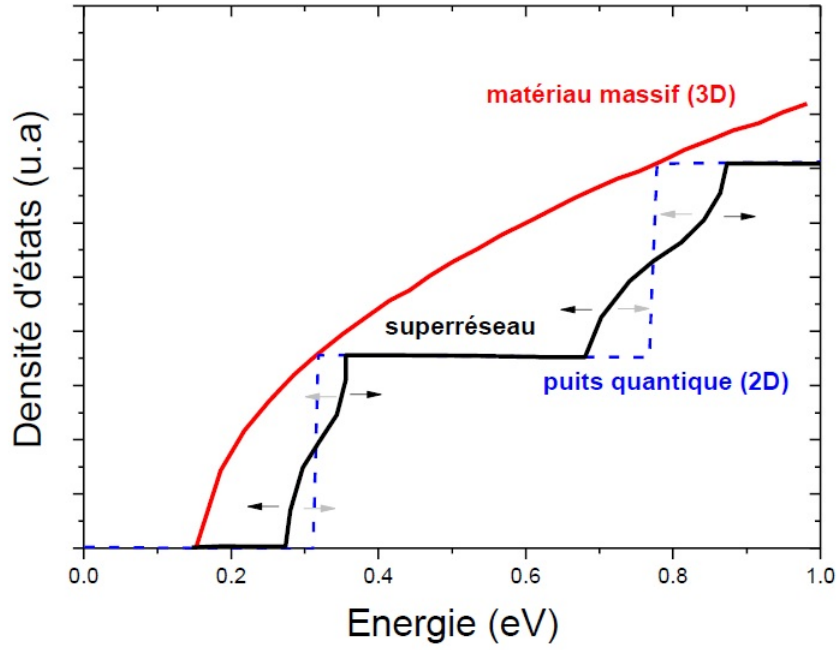


FIGURE 2.5: Représentation schématic de la densité d'états pour un superréseau et comparaison avec celles d'un puits quantique (2D) et d'un matériau massif (3D).

théorie et expérience sur une structure SR GaSb-rich. En effet cette structure, du fait de sa nature 2D, aura un spectre d'absorption avec des "marches" reflétant la densité d'états qui nous donneront ainsi l'information sur la position énergétique des transitions inter-bandes supérieures à l'énergie de bande interdite.

En conclusion, on peut déjà penser que la structure SR la plus adaptée à l'absorption est InAs-rich du fait de son fort recouvrement des fonctions d'onde et de sa densité jointe d'état proche de celle d'un matériau 3D. Il faudra cependant s'intéresser au transport, c'est-à-dire à la collecte des photoporteurs dans une photodiode dont la zone d'absorption est un SR InAs-rich, avant de conclure sur l'avantage d'utiliser ce type de structure pour la détection IR.

## 2.2 MODÉLISATION DE LA STRUCTURE DE BANDE ET DES FONCTIONS D'ONDE

Comme introduit dans le premier chapitre, le modèle choisi pour cette modélisation est un modèle **kp** 18 bandes. La méthode **kp** a été présentée de manière générale dans le chapitre 1, je vais ici rentrer plus avant dans le détail des calculs ainsi que des particularités de ma méthode.

### 2.2.1 Présentation du calcul

Je rappelle que pour notre utilisation de la méthode **kp** on a fait l'approximation de la fonction enveloppe, i.e. l'enveloppe de la fonction d'onde est invariante à l'échelle de la cellule élémentaire. Cette dernière est définie dans les directions  $x$  et  $y$  par la

maille du matériau et dans la direction  $z$  par l'épaisseur de la période du SR. La fonction d'onde a donc la forme suivante :

$$\Psi_{n,\vec{k}}^{A,B}(\vec{r}) = \sum_b \chi_{b,n}^{A,B}(z) e^{i\vec{k}_{//} \cdot \vec{R}_{//}} u_b(\vec{r}, z) \quad (2.4)$$

Où  $\vec{k}_{//}$  et  $\vec{R}_{//}$  sont respectivement le vecteur d'onde et le vecteur position dans le plan, i.e. dans la direction perpendiculaire à la direction de croissance. Les fonctions de Bloch, que l'on a considéré semblables dans les deux matériaux, varient "beaucoup" à l'échelle de la cellule élémentaire. Je fais alors l'approximation que la fonction enveloppe  $\chi_{b,n}^{A,B}(z)$  varie lentement à cette échelle et sera considérée comme constante dans la cellule élémentaire. De plus, la fonction enveloppe est continue aux interfaces, i.e.  $\chi_{b,n}^A(z_i) = \chi_{b,n}^B(z_i)$ , où  $z_i$  est la position d'une interface.

En plus du développement habituel des fonctions d'onde sur la base des fonctions de Bloch en centre de zone de Brillouin, je réalise un développement en série de Fourier de la partie de la fonction enveloppe dans la direction  $z$ , i.e. la direction de croissance du SR. Nos fonctions d'onde s'écrivent alors sous la forme d'une somme dans laquelle l'index  $b$  représente les 18 bandes prises en compte dans notre calcul et  $m$  est compris dans  $[-N_G; N_G]$ , le nombre de composantes de Fourier que l'on garde dans notre développement :

$$\Psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{m,b} a_n^{m,b}(\vec{k}) e^{i(k_z + G_m)z} e^{i\vec{k}_{||} \cdot \vec{R}} u_b(\vec{r}, z) \quad (2.5)$$

Où  $a_n^{m,b}(\vec{k})$  sont les coefficients de la fonction enveloppe et  $\vec{G}_m = 2m\pi/d$ .  $\vec{k}_{||}$  et  $\vec{R}$  représentent respectivement les composantes dans la direction perpendiculaire à la croissance du vecteur d'onde  $\vec{k}$  et du vecteur position  $\vec{r}$ .

Si on projette l'hamiltonien SR de l'équation 1.6 avec le potentiel exprimé comme dans l'équation 1.25 dans la base de nos fonctions d'onde de l'équation 2.5, on obtient :

$$H_{SR} \Psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{m,b} a_n^{m,b}(\vec{k}) e^{i(\vec{k} + \vec{G}_m) \cdot \vec{r}} \left[ \left\{ \frac{p^2}{2m_0} + V_c(\vec{r}, z) + V_{VB}(z) \right\} u_{b,0}(\vec{r}, z) + \frac{\hbar^2 (\vec{k} + \vec{G}_m)^2}{2m_0} u_{b,0}(\vec{r}, z) + \frac{\hbar}{m_0} (\vec{k} + \vec{G}_m) \vec{p} u_{b,0}(\vec{r}, z) \right] \quad (2.6)$$

Le dernier terme de notre équation est le terme  $\vec{k} \cdot \vec{p}$  dont vient le nom de la méthode. L'approximation de la fonction enveloppe consiste maintenant à considérer qu'à l'échelle de chaque cellule élémentaire, seules les fonctions de Bloch varient, tout autre fonction est considérée comme invariante. Je multiplie alors l'équation (2.6)

par le terme  $e^{-i(\vec{k}+\vec{G}_m)\vec{r}} u_{b',0}^*(\vec{r}, z)$  et j'intègre ensuite l'équation sur l'ensemble du volume pour obtenir l'équation suivante :

$$\begin{aligned} & \sum_{m,m',b,b'} a_n^{m,b}(\vec{k}) \left\{ \frac{\hbar^2(\vec{k}+\vec{G}_m)^2}{2m_0} \delta(m, m') \delta(b, b') \right. \\ & + \frac{1}{d} \int_0^d e^{i(G_m - G_{m'})z} [E_b(z) + V_{VB}(z)] dz \delta(b, b') \\ & \left. + \frac{\hbar}{m_0} (\vec{k} + \vec{G}_m) \frac{1}{d} \int_0^d e^{i(G_m - G_{m'})z} \vec{p}_{b,b'}(z) dz \right\} \\ & = E_n(\vec{k}) a_n^{b',m'}(\vec{k}) \quad (2.7) \end{aligned}$$

Où  $\vec{p}_{b,b'} = \{u_{b',0}^*(\vec{r}, z) | \vec{p} | u_{b,0}(\vec{r}, z)\}$  et  $d$  est l'épaisseur de la période du SR. Le calcul et le résultat ici obtenus sont semblables au calcul **kp** général présenté dans le chapitre 1 et les équations 1.29 et 2.7 sont équivalentes à la différence que dans ma méthode, j'ai réalisé un développement en série de Fourier de la fonction enveloppe. Le terme  $\vec{k}$  de l'équation 1.29 devient dans mon cas  $(\vec{k} + \vec{G}_m)$ . Finalement, Je trouve donc bien l'expression d'une matrice à diagonaliser de taille  $18(2n+1) \times 18(2n+1)$ .

Il faut maintenant intégrer dans notre modèle les contraintes présentes dans la structure. Je considère que la maille de tous les éléments du SR est fixée par le substrat. Autrement dit, je ne prend en compte que les contraintes dues au substrat et je néglige les contraintes aux interfaces entre les matériaux du SR. Nous verrons en effet dans la partie suivante que l'ajout d'InSb dans la période permet de la compenser au fur et à mesure de la croissance du SR. Le substrat utilisé étant en GaSb, seul l'InAs est contraint dans la structure et du fait de sa maille inférieure à celle du GaSb, il est en tension. La contrainte est modélisée en intégrant les éléments de Bir-Pikus dans notre matrice de l'équation 2.7 [Bir *et al.*, 1974].

Ces éléments sont calculés à l'aide du désaccord de maille entre l'InAs et le GaSb et ajouté à la matrice. Les différentes contributions sont :

- Des éléments de matrice diagonaux qui changent la position des bandes d'énergie en centre de zone de Brillouin de la première bande de conduction et des bandes de valences de l'InAs. Le substrat étant en GaSb, le GaSb dans la période n'est pas contraint et donc ses niveaux d'énergie ne bougent pas. Un des principaux effets sur l'InAs de la prise en compte de cette contrainte est la levée de dégénérescence en centre de zone de Brillouin entre les bandes de valence de trous lourds et de trous légers.
- Des éléments de matrice non-diagonaux qui couplent la bande de spin-orbit avec la bande de valence de trous lourds.

Enfin l'influence de la contrainte sur les bandes de conduction hautes en énergie étant inconnue, aucun effet ne sera pris en compte sur ces bandes là.

En résumé, les éléments qui doivent être connus expérimentalement pour écrire la matrice de l'équation 2.7 sont les niveaux d'énergie  $E_i$  en centre de zone de

Brillouin, les éléments de matrice  $P_{b,b'}$ , le décalage d'énergie entre la première bande de valence de l'InAs et la première bande de valence du GaSb, c'est-à-dire le bandoffset introduit par le potentiel  $V_{VB}$  et enfin les potentiels de déformation. Les éléments de matrice  $P_{b,b'}$  sont liés à l'élément de matrice  $\vec{p}_{b,b'}$  de l'équation 2.7 par la relation suivante :

$$P_{b,b'}^2 = \frac{2}{m_0} |\vec{p}_{b,b'}|^2 \quad (2.8)$$

Où  $m_0$  est la masse de l'électron libre. L'ensemble de la matrice est présentée en annexe B.

Une fois la matrice écrite, une simple diagonalisation permet de remonter aux valeurs propres à savoir les niveaux d'énergie  $E_n(\vec{k})$  de la structure de bande et aux vecteurs propres : les coefficients  $a_n^{(m,b)}(\vec{k})$ , à partir desquels on peut recomposer les fonctions d'onde. Sur la figure 2.6 sont présentées les structures de bande ainsi

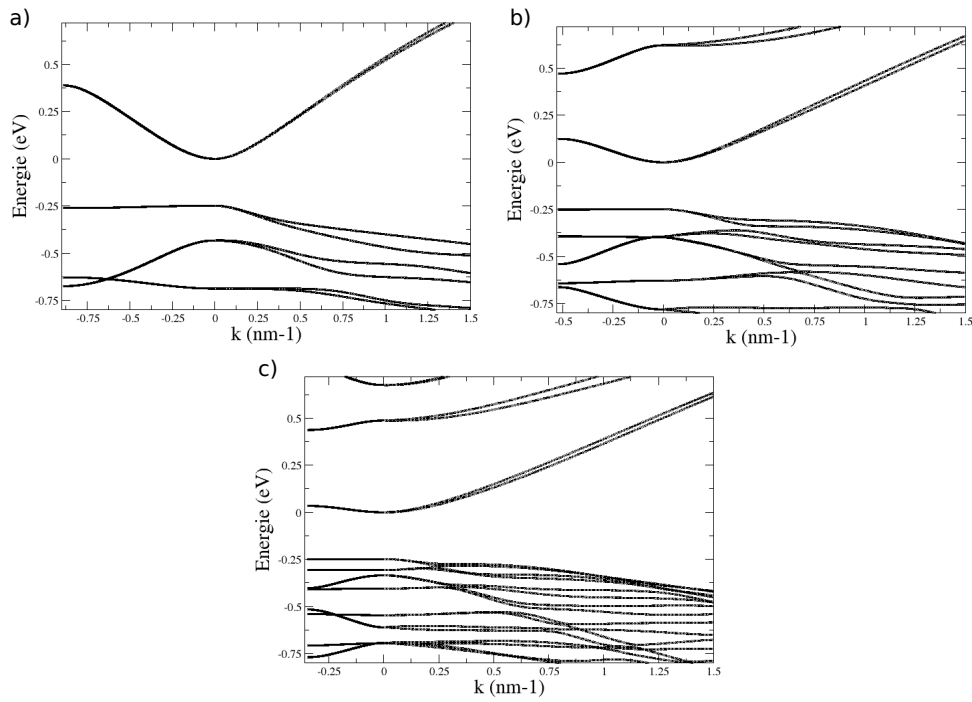


FIGURE 2.6: Structures de bande des SR : a) InAs-rich (7 MC d'InAs / 4 MC de GaSb) b) symétrique (10 MC d'InAs / 10 MC de GaSb) c) GaSb-rich (10 MC d'InAs / 19 MC de GaSb) calculées à l'aide de la méthode kp dans les directions  $[1,0,0]$  (valeurs positives de  $\vec{k}$ ) et  $[0,0,1]$  (valeurs négatives de  $\vec{k}$ ), i.e. la direction de croissance du SR.

obtenues pour :

- une structure SR InAs-rich 7MC d'InAs / 4MC de GaSb.
- une structure SR symétrique 10MC d'InAs / 10MC de GaSb.
- une structure SR GaSb-rich 10MC d'InAs / 19MC de GaSb.

La première information que l'on peut obtenir de ces structures de bande est l'énergie de bande interdite, qui correspond à la différence d'énergie entre la première bande de valence et la première bande de conduction au centre de la première zone de Brillouin.

Je vais maintenant présenter les différentes grandeurs physiques ayant une influence sur la modélisation des énergies de bande interdite.

### 2.2.2 Influence de la structure de la période

Pour obtenir une bonne représentation du SR, il faut connaître sa période précisément. Sans essayer d'obtenir une description atomique de la période, il faut connaître les matériaux qui la composent et leurs épaisseurs respectives. Or, comme je l'ai introduit dans le premier chapitre, le SR InAs/GaSb peut avoir deux interfaces différentes au contact de l'InAs et du GaSb : soit l'InSb, soit le GaAs. Pour savoir comment sont faites nos interfaces il faut s'intéresser à la croissance du SR.

Il existe un désaccord de maille entre l'InAs ( $a_{\text{InAs}}(300\text{K}) = 6,0583\text{\AA}$ ) et le GaSb ( $a_{\text{GaSb}}(300\text{K}) = 6,0959\text{\AA}$ ). Du fait du paramètre de maille inférieur de l'InAs, ce dernier se retrouve en tension lorsqu'il est déposé sur le GaSb. Cela introduit des contraintes et leur accumulation peut détériorer le SR lorsque l'épaisseur devient importante.

J'évalue le désaccord de paramètre de maille moyen du SR sur substrat GaSb de la manière suivante :

$$\left. \frac{\Delta a}{a} \right|_{\text{SR}} = \frac{a_{\text{SR}} - a_{\text{GaSb}}}{a_{\text{GaSb}}} \quad (2.9)$$

où :

$$a_{\text{SR}} = \frac{a_{\text{InAs}} \cdot n_{\text{InAs}} + a_{\text{GaSb}} \cdot n_{\text{GaSb}}}{n_{\text{InAs}} + n_{\text{GaSb}}} \quad (2.10)$$

$n_{\text{InAs}}$  et  $n_{\text{GaSb}}$  étant le nombre de monocouches atomiques d'InAs et de GaSb dans la période.

Pour un SR symétrique (10MC de GaSb / 10MC d'InAs), le désaccord de maille est de 0.632%, ce qui est trop important pour faire croître une structure épaisse de plusieurs microns. Il a donc été choisi à l'IES de compenser cette contrainte en insérant une fine couche d'InSb à l'interface entre le GaSb et l'InAs [Rodriguez *et al.*, 2005b; Satpati *et al.*, 2007]. Il a été montré que le SR est accordé pour une épaisseur d'InSb de 1MC toutes les 10MC d'InAs et quelle que soit l'épaisseur de GaSb. La figure 2.7 présente le potentiel de la période d'un SR symétrique comme il sera modélisé par mon code avec prise en compte de l'InSb aux interfaces. Or, sur la figure 2.8 sont présentées les énergies de bande interdite calculées par la méthode **kp** 18 bandes pour les trois types de structures SR à plusieurs épaisseurs de période, avec ou sans prise en compte de l'InSb dans la période. Nous pouvons voir que la présence d'InSb diminue fortement l'énergie de bande interdite du SR (entre 20% et 5% selon la structure SR). Il ne peut donc pas être négligé et sera maintenant pris en compte dans toutes les modélisations.

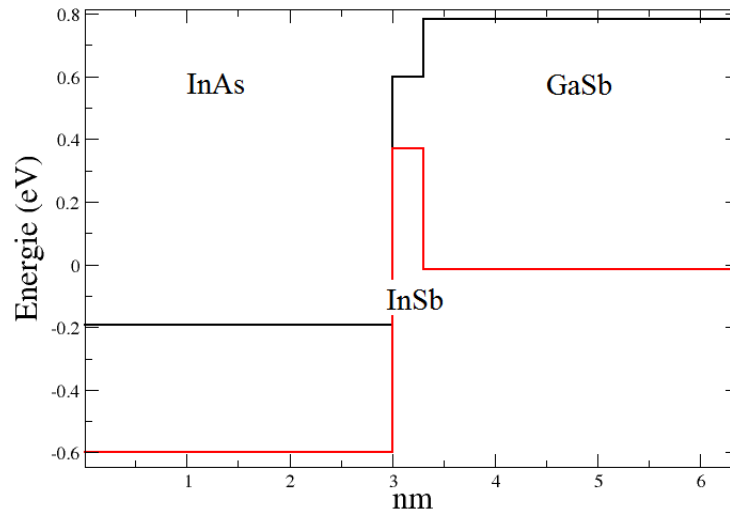


FIGURE 2.7: Potentiel d'un SR symétrique (10 MC d'InAs/10 MC de GaSb) avec prise en compte de l'InSb aux interfaces. En noir sont représentées les bandes de conduction des matériaux et en rouge les bandes de valence.

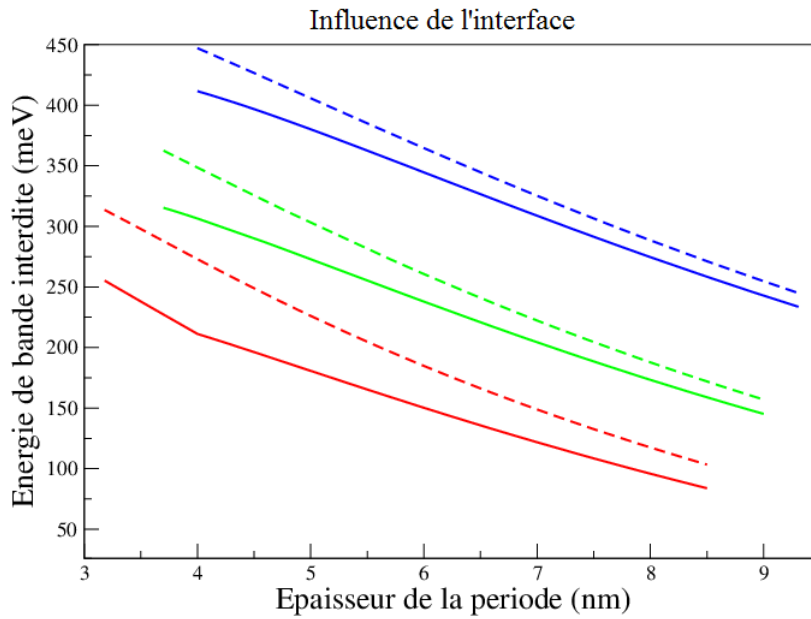


FIGURE 2.8: Énergies de bande interdite calculées en fonction de l'épaisseur de la période pour les trois types de SR InAs-rich (7 MC d'InAs / 4 MC de GaSb) (rouge), symétrique (10 MC d'InAs / 10 MC de GaSb) (vert) et GaSb-rich (10 MC d'InAs / 19 MC de GaSb) (bleu). Les traits pleins correspondent aux calculs pour lesquels l'InSb a été pris en compte dans la structure, les traits pointillés aux calculs où il n'a pas été intégré.

### 2.2.3 Influence des paramètres matériaux

Notre modèle ne comporte pas de paramètre ajustable physique. Cependant, une des hypothèses de base est que les valeurs des paramètres des matériaux dans la structure SR sont les mêmes que les valeurs des paramètres des matériaux massifs. Les paramètres d'entrée utilisés dans notre code, qui sont les niveaux d'énergie, les éléments de matrice et les paramètres de contrainte, sont donc issus de mesures expérimentales sur les matériaux massifs. Or certains de ces paramètres physiques sont mal connus expérimentalement.

[Vurgaftman *et al.*, 2001] a réalisé un travail de synthèse sur les paramètres des matériaux III-V. En se basant sur ses travaux, j'ai pu déterminer les paramètres matériaux peu ou mal connus expérimentalement pour l'InAs, le GaSb et l'InSb. Je présente dans le tableau 2.1 les paramètres dont les variations ont une influence sur les résultats de modélisation des énergies de bande interdite des SRs.

TABLE 2.1: Paramètres matériaux utilisés dans la modélisation **kp** dont la valeur expérimentale est mal connue

paramètres	Bandoffset InAs	Bandoffset InSb	Paramètres de contrainte de l'InAs	
			$a_c$	b
Domaine de variation (meV)	[525; 575]	[-80; 160]	[-11, 7; -5, 08]	[-8; -2, 57]
Valeur de référence (meV)	525	-30	-5,08	-1,8

La valeur de bandoffset du tableau est le décalage absolu entre les bandes de valence en centre de zone de Brillouin du matériau et celle du GaSb. En effet le matériau GaSb est notre matériau de référence : la position de sa bande de valence a été arbitrairement choisie comme l'origine des énergies. La valeur des bandoffsets des autres matériaux est donc l'écart entre la bande de valence du matériau et de la bande de valence du GaSb.

Je vais étudier l'influence des variations de ces paramètres sur la modélisation de l'énergie de bande interdite en utilisant les valeurs extrêmes de leur domaine de variation. Les autres paramètres variables sont alors fixés à leurs valeurs conseillées par Vurgaftman *et al* appelées valeurs de référence. Toutes les simulations sont réalisées à 80K, température à laquelle seront faites l'essentiel des mesures de PL et d'absorption qui serviront pour les comparaisons.

La forte variation du bandoffset InAs/GaSb (50 meV) s'explique par le fait que cette valeur n'est pas directement mesurable expérimentalement. Les mesures sont indirectes et selon les sources, donnent des résultats allant de 450 à 700 meV. Il est conseillé pour la modélisation d'hétérojonction InAs/GaSb de prendre une

valeur entre 510 meV et 560 meV dans le cas où les interfaces ne sont pas connues. Il a été de plus expérimentalement montré que si les interfaces sont forcées de type InSb, alors la valeur du bandoffset InAs/GaSb est en moyenne plus grande de 15 meV [Vurgaftman *et al.*, 2001]. Inversement si les interfaces sont de type GaAs cette valeur sera diminuée de 15 meV. Nos interfaces sont, comme nous avons pu le voir, forcées de type InSb. Nous ajoutons donc 15 meV à la valeur du bandoffset InAs/GaSb. Ce qui donne une variation allant de 525 à 575 meV.

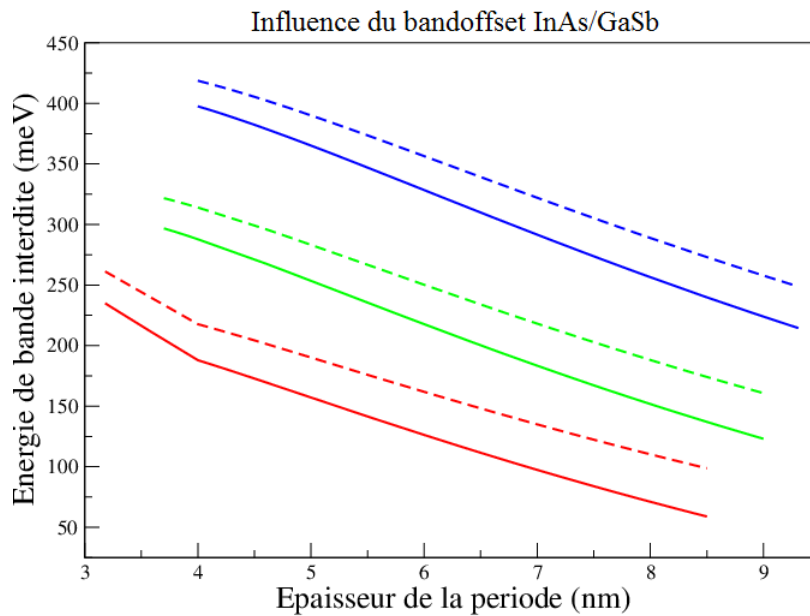


FIGURE 2.9: Énergie de bande interdite en fonction de l'épaisseur de la période pour les trois types de SR InAs-rich (7 MC d'InAs / 4 MC de GaSb) (rouge), symétrique (10 MC d'InAs / 10 MC de GaSb) (vert) et GaSb-rich (10 MC d'InAs / 19 MC de GaSb) (bleu). Les traits pleins correspondent aux calculs faits avec la valeur maximale du bandoffset InAs/GaSb (575 meV) et les traits pointillés à ceux faits avec la valeur minimale du bandoffset InAs/GaSb (525 meV).

Sur la figure 2.9, on peut voir que ce paramètre a une forte influence sur les énergies de bande interdite des trois types de SR et qu'il fait varier leurs énergies de bande interdite du même ordre de grandeur ( $\Delta E \approx 25$  à  $40\text{meV}$ ). La variation de l'énergie de bande interdite est plus importante pour les SR de grande épaisseur de période. Les courbes présentées montrent que c'est un paramètre important de la modélisation, qui de plus est mal connu expérimentalement. Ce paramètre matériau a donc une forte influence pour obtenir une comparaison valable entre expérience et modélisation.

Vurgaftman *et al* recommande une valeur intermédiaire pour le bandoffset InSb/GaSb égale à 30 meV. Cette valeur est moyennée sur plusieurs travaux théoriques sur le sujet qui suggèrent une variation allant de -80 à 160 meV (où la valeur est positive si la bande de valence de l'InSb est au-dessus de celle du GaSb). La figure 2.10 montre que ce paramètre n'influe pas de la même manière sur les



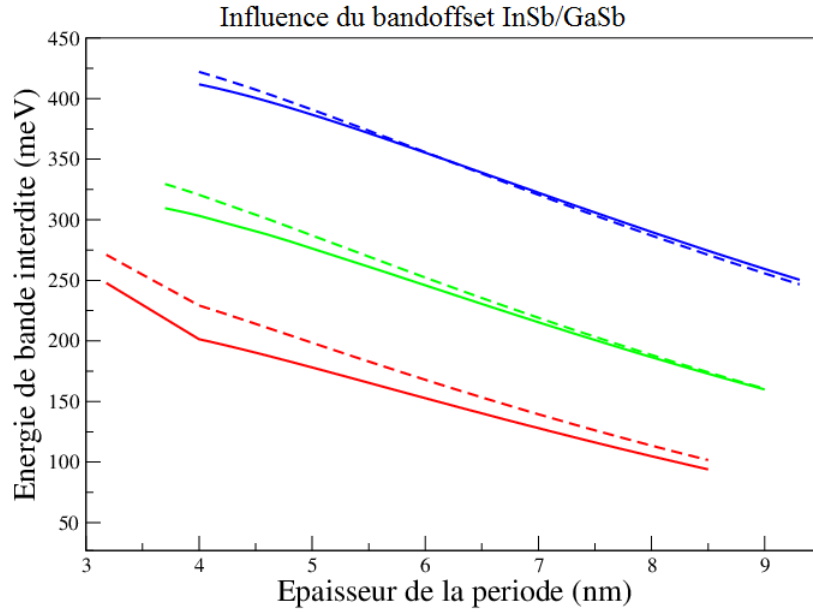


FIGURE 2.10: Énergie de bande interdite en fonction de l'épaisseur de la période pour les trois types SR InAs-rich (7 MC d'InAs / 4 MC de GaSb) (rouge), symétrique (10 MC d'InAs / 10 MC de GaSb) (vert) et GaSb-rich (10 MC d'InAs / 19 MC de GaSb) (bleu). Les traits pleins correspondent aux calculs faits avec la valeur maximale du bandoffset InSb/GaSb (160 meV) et les traits pointillés à ceux faits avec la valeur minimale du bandoffset InSb/GaSb (-80 meV).

trois types de SR. On sait que la quantité d'InSb dans la période est d'1 MC pour 10 MCs d'InAs et cela quelle que soit l'épaisseur de GaSb. La proportion d'InSb par rapport à l'épaisseur totale de la période est donc d'autant plus importante que la proportion d'InAs est grande par rapport à l'épaisseur totale de la période. De ce fait, il est donc logique que le bandoffset de l'InSb ait une plus forte influence dans un SR InAs-rich que pour un SR GaSb-rich, c'est d'ailleurs ce que l'on observe dans les calculs (figure 2.10).

De plus, dans notre modèle, les interfaces dans la période sont prises en compte par l'introduction d'InSb à la jonction des matériaux InAs et GaSb. Or, plus l'épaisseur totale de la période est faible, plus les effets des interfaces sont importants. C'est aussi ce qu'on observe quand on fait varier le bandoffset de l'InSb dans notre modèle, les énergies de bande interdite des SR varient plus pour les faibles épaisseurs de périodes (figure 2.10).

Dans le cas des potentiels de déformation, il existe malheureusement peu de valeurs expérimentales et les valeurs proposées par Vurgaftman sont des valeurs issues de calcul.

Le potentiel de déformation  $a_c$  a une influence comparable sur les trois types de SR quelle que soit la période du SR ( $\Delta E \approx 25 \text{ meV}$  figure 2.11). Il est important de noter que ce paramètre aura une influence sur la modélisation des énergies de bande interdite des SR en fonction de la température. En effet, la maille des matériaux étant dépendante de la température, comme on le verra dans la section suivante,

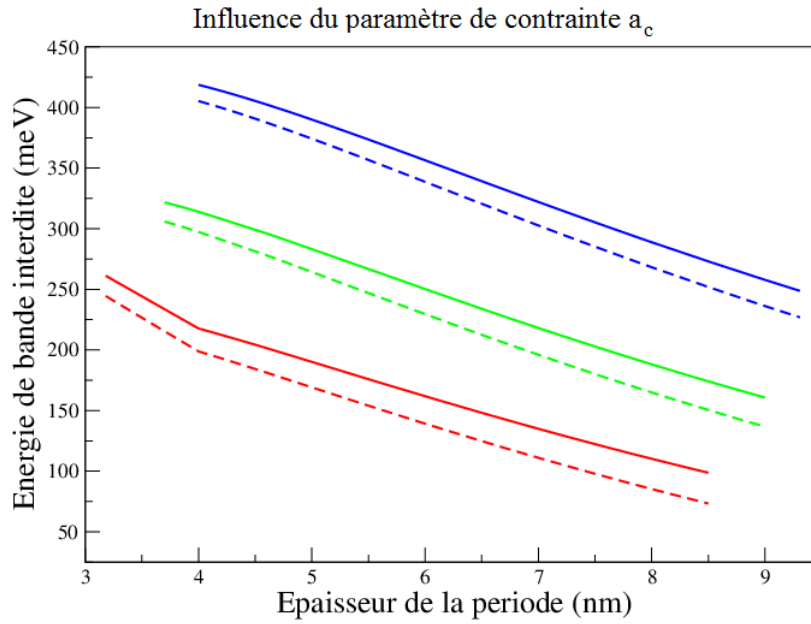


FIGURE 2.11: Énergie de bande interdite en fonction de l'épaisseur de la période pour les trois types de SR InAs-rich (7 MC d'InAs / 4 MC de GaSb) (rouge), symétrique (10 MC d'InAs / 10 MC de GaSb) (vert) et GaSb-rich (10 MC d'InAs / 19 MC de GaSb) (bleu). Les traits pleins correspondent aux calculs faits avec la valeur maximale du potentiel de déformation des bandes de conduction  $a_c$  de l'InAs (-5,08 eV) et les traits pointillés à ceux faits avec la valeur minimale de  $a_c$  (-11,7 eV).

ceci influera directement sur la contrainte du GaSb sur l'InAs.

On voit cependant que le paramètre de déformation  $b$  de l'InAs a une influence assez faible sur la modélisation et crée un décalage constant sur l'énergie de bande interdite ( $\Delta E \approx 15 \text{ meV}$  figure 2.12). Je prendrai donc, par la suite, la valeur recommandée de -1.8 eV pour ce paramètre.

Le choix final des valeurs utilisées pour le bandoffset de l'InAs, le bandoffset de l'InSb et le potentiel de déformation  $a_c$  de l'InAs sera fait par comparaison avec des valeurs expérimentales de l'énergie de bande interdite. Le tableau 2.2 résume l'ensemble des valeurs utilisées dans ma modélisation dont les valeurs expérimentales sont précisément connues.

TABLE 2.2: Niveaux d'énergie des différentes bande de valence et de conduction, éléments de matrice et potentiel de déformation utilisés dans le code kp 18 bandes

(eV)	$\Delta_{SO}$	$E_g$	$E_7$	$E_8$	$E_3$	$p^2$	$p'^2$	$Q^2$	$R^2$	$a_c$	$a_v$	$b$
InAs	0,38	0,42	4,44	4,6	5	22,2	9,0	22,0	16,0	-	-1,0	-
GaSb	0,76	0,81	3,191	3,404	5	25,0	6,0	14,5	9,0	-7,5	-0,8	-2,0
InSb	0,81	0,235	3,16	3,49	5	24,4	10,5	16,0	11,8	-6,94	-0,36	-2,0

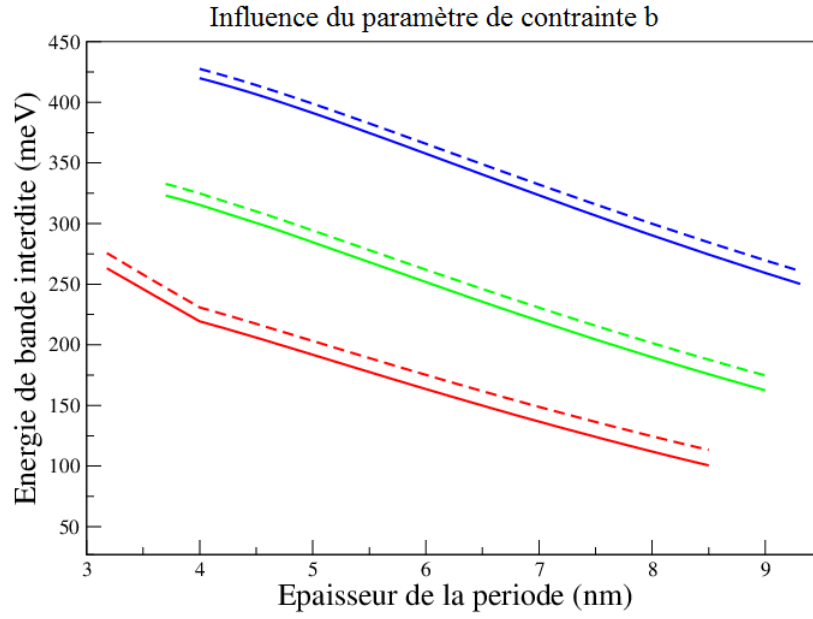


FIGURE 2.12: Énergie de bande interdite en fonction de l'épaisseur de la période pour les trois types de SR InAs-rich (7 MC d'InAs / 4 MC de GaSb) (rouge), symétrique (10 MC d'InAs / 10 MC de GaSb) (vert) et GaSb-rich (10 MC d'InAs / 19 MC de GaSb) (bleu). Les traits pleins correspondent aux calculs faits avec la valeur maximale du potentiel de déformation  $b$  de l'InAs (-2.57 eV) et les traits pointillés à ceux faits avec la valeur minimale de  $b$  (-8 eV).

#### 2.2.4 Influence de la température

Dans le modèle **kp**, la température influe sur la modélisation des énergie de bande interdite du SR par l'intermédiaire des paramètres matériaux qui dépendent de la température : L'énergie de bande interdite et le paramètre de maille. Leur dépendance suit une loi empirique de la forme :

$$a(T) = a(300K) + \gamma * 10^{-5}(T - 300) \quad (2.11)$$

Où  $\gamma$  est un paramètre fixe et empirique.

TABLE 2.3: Paramètre de maille et paramètre de sa dépendance en fonction de la température des matériaux de la période du SR.

	$a(300K)(\text{\AA})$	$\gamma(\text{\AA} \cdot K^{-1})$
InAs	6,0583	2,74
GaSb	6,0959	4,72
InSb	6,4794	3,48

Les énergies de bande suivent une loi empirique [Varshni, 1967], de la forme :

$$E_{Gap}(T) = E_0 + \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \quad (2.12)$$

Où  $\alpha$  et  $\beta$  sont des paramètres fixes et empiriques et  $E_0$  est la valeur du gap pour  $T = 0K$ .

TABLE 2.4: Énergie de bande interdite à 0K et paramètres de Varshni des matériaux de la période du SR.

	$E_0(T = 0K)(eV)$	$\alpha(meV \cdot K^{-1})$	$\beta(K)$
InAs	0,4103	276	83
GaSb	0,812	417	140
InSb	0,2352	600	500

Selon [Vurgaftman *et al.*, 2001], seuls les paramètres  $\alpha$  et  $\beta$  de l'énergie de bande interdite du GaSb sont mal connus :  $\alpha \in [108; 453] meV \cdot K^{-1}$  et  $\beta \in [-10; 186] K$ . Les figures 2.13 et 2.14 présentent les énergies de bande interdite des trois structures SR étudiées en fonction de la température pour les valeurs limites de respectivement  $\alpha$  et  $\beta$ .

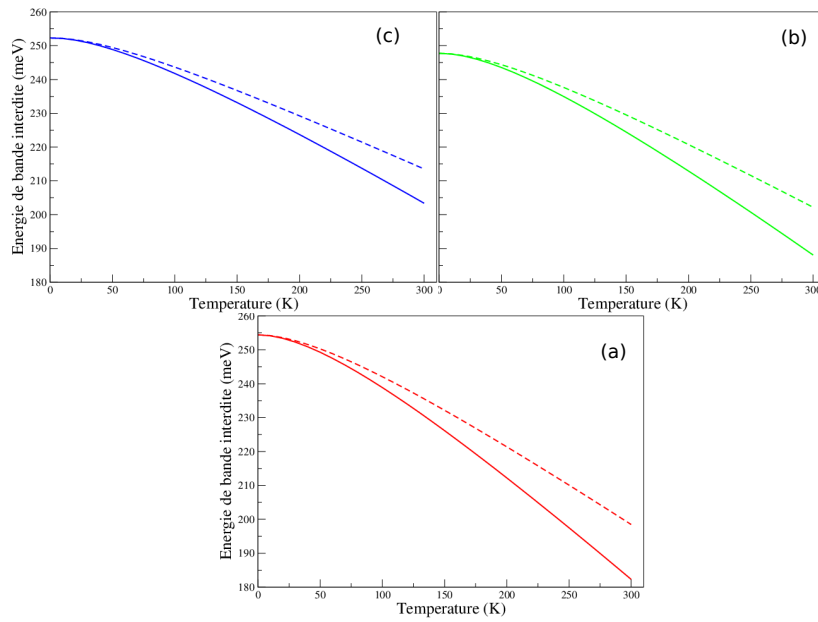


FIGURE 2.13: Énergie de bande interdite en fonction de la température pour les trois types de SR (a) InAs-rich 7/4 (rouge), (b) symétrique 10/10 (vert) et (c) GaSb-rich 10/19 (bleu). La valeur de  $\beta$  est fixée à la valeur conseillée par Vurgaftman de 140 K. Les traits pleins correspondent aux calculs faits avec la valeur maximale du paramètre de Varshni  $\alpha$  du GaSb (453 meV/K) et les traits pointillés à ceux faits avec la valeur minimale de  $\alpha$  (108 meV/K).

Ces deux paramètres seront à prendre en compte pour obtenir une comparaison satisfaisante entre expérience et modélisation.

Nous avons de plus fait l'hypothèse que les paramètres de contrainte  $a_c$ ,  $a_v$  et  $b$  sont indépendants de la température.

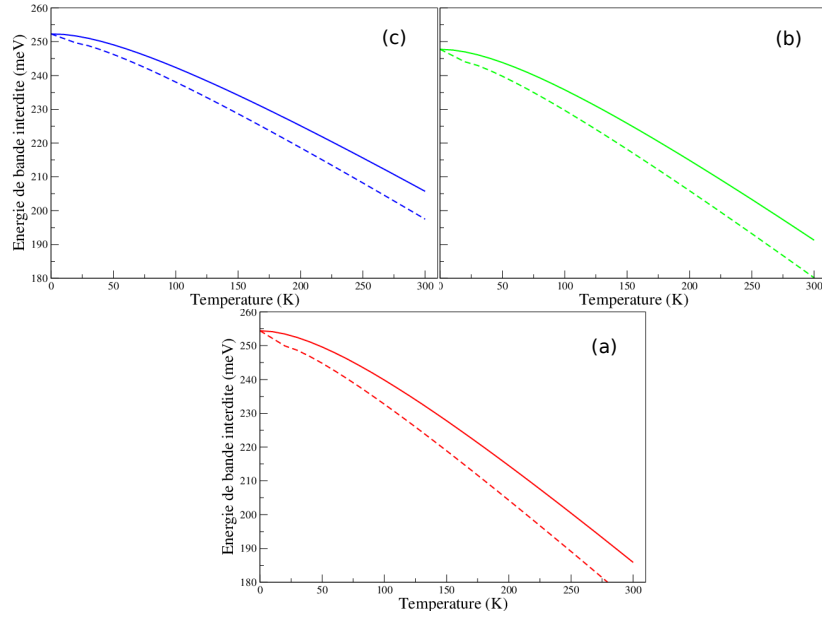


FIGURE 2.14: Énergie de bande interdite en fonction de la température pour les trois types de SR (a) InAs-rich 7/4 (rouge), (b) symétrique 10/10 (vert) et (c) GaSb-rich 10/19 (bleu). La valeur de  $\alpha$  est fixée à la valeur conseillée par Vurgaftman de 417 meV/K. Les traits pleins correspondent aux calculs faits avec la valeur maximale du paramètre de Varshni  $\beta$  du GaSb (186 K) et les traits pointillés à ceux faits avec la valeur minimale de beta (-10 K).

## 2.3 COMPARAISON ENTRE EXPÉRIENCE ET MODÈLE POUR LES ÉNERGIES DE BANDE INTERDITES

Dans un premier temps, je vais expliquer comment ont été obtenues les mesures des énergies de bande interdite de nos SR, puis je comparerai ces résultats à ma modélisation et conclurai sur le choix final des paramètres matériaux.

### 2.3.1 Mesures des gaps par photoluminescence

Les énergies de bande interdite des SR sont obtenues par une mesure de photoluminescence. Ces mesures sont réalisées de manière systématique à l'IES pour déterminer les énergies de bande interdite des SR de 10 à 300K. Un faisceau laser avec une longueur d'onde d'émission de 830 nm est focalisé sur l'échantillon pour l'exciter. Les photons absorbés créent des paires électron-trou. La probabilité de recombinaison radiative d'une paire électron-trou est plus élevée au voisinage du centre de zone de Brillouin ( $k = 0$ ) ce qui se traduit par un maximum du pic de photoluminescence à la longueur d'onde correspondant au gap du matériau. La luminescence émise par ce dernier est focalisée sur l'entrée d'un spectromètre infrarouge à transformée de Fourier (FTIR) qui traite le signal optique reçu. La figure 2.15 présente les spectres de photoluminescence à 80K des trois structures type. Cette mesure permet de vérifier que la longueur d'onde de coupure du SR réalisé est celle visée au moment du choix de la structure. Dans notre cas, il s'agit de la valeur cible de  $5\mu\text{m}$  à 80K pour les trois SR.

La forme de ces spectres montre le comportement différent de chaque structure. Nous retrouvons pour le SR « GaSb-rich » (en bleu,  $R = 0,536$ ) la forme lorentzienne asymétrique typique d'un matériaux 2D alors que pour le SR « InAs-rich » (en rouge,  $R = 1,75$ ) la forme du spectre est plus étalée et de forme gaussienne semblable aux matériaux 3D. La structure symétrique (en vert,  $R = 1$ ) a quant à elle une forme de spectre intermédiaire entre le puits quantique et le matériau massif.

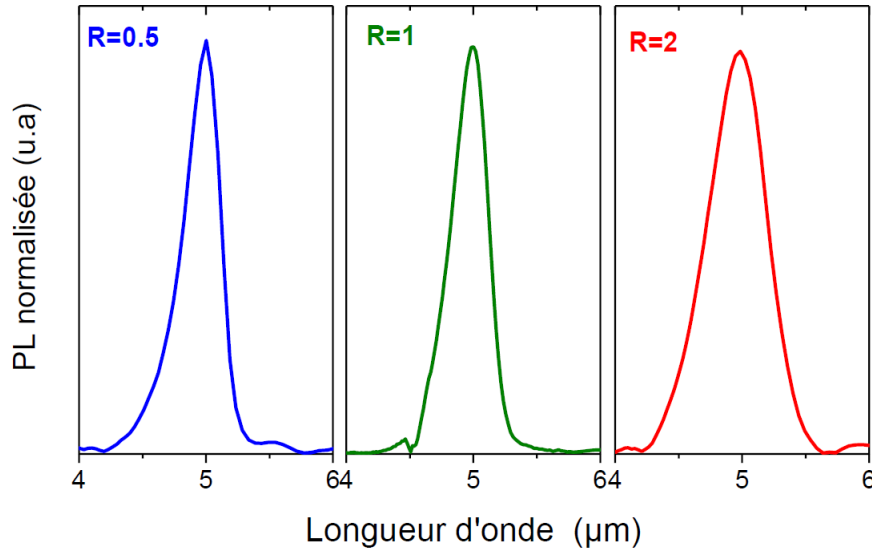


FIGURE 2.15: Spectres de photoluminescence mesurés au FTIR à 80K pour les trois structures GaSb-rich, symétrique et InAs-rich. Figure issue de [Taalat, 2013]

### 2.3.2 Précision des points de mesures

Lors de la réalisation de toutes les structures SR, une mesure de diffraction par rayon X (DDX pour double diffraction de rayon X) est réalisée de manière routinière. Cette mesure permet de caractériser la qualité structurale des SR épitaxiés.

En effet, le désaccord de maille entre le SR InAs/GaSb et le substrat GaSb est caractérisé par l'écart entre le pic principal du SR et celui du substrat. On observe sur la figure 2.16 que les pics centraux de diffractions dus au substrat de GaSb et du SR sont confondus, montrant que la compensation de contrainte a été correctement réalisée et ceci pour tous les types de structures SR fabriquées. De plus, la largeur à mi-hauteur très faible des pics satellites ( $SR_1, SR_{-1}, \dots$ ) atteste de la qualité structurale des interfaces.

Enfin, et c'est la partie qui nous intéresse ici, à partir des positions des pics satellites du SR il est possible de remonter avec précision à l'épaisseur de la période de celui-ci en utilisant la loi de Bragg. Du fait de cette mesure, l'épaisseur totale de la période est précisément connue pour l'ensemble de nos échantillons utilisés pour les mesures de PL et comparés à la modélisation.

En cherchant alors à réaliser une structure SR composé de  $n_{\text{InAs}}$  MC d'InAs et de  $n_{\text{GaSb}}$  MC de GaSb, on s'attend donc à obtenir une épaisseur totale de période

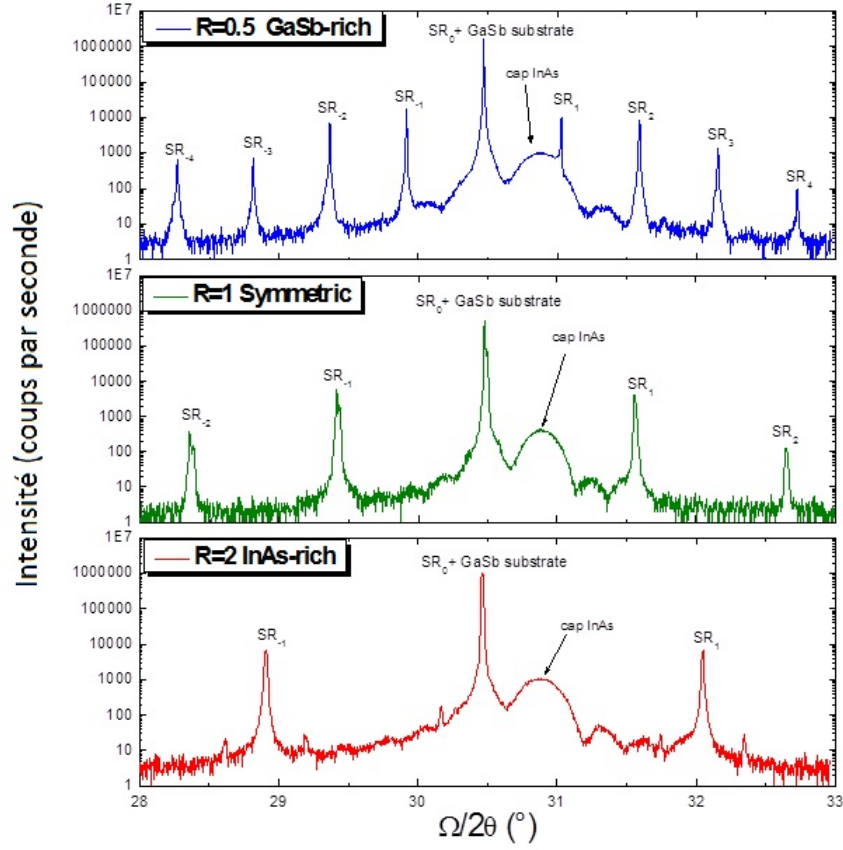


FIGURE 2.16: Spectre de diffraction X montrant le SR accordé sur le substrat pour les trois structures SR étudiées.

égale à  $n_{\text{InAs}} * a_{\text{InAs}} + n_{\text{GaSb}} * a_{\text{GaSb}}$  où  $a_{\text{InAs}}$  et  $a_{\text{GaSb}}$  sont les paramètres de maille. Cependant, une fois la structure réalisée, on observe des écarts avec la valeur visée. En effet, lors de la réalisation on peut avoir, au maximum, une erreur d'1 MC sur l'épaisseur d'un des deux matériaux de la période.

Or si la méthode DDX nous permet de remonter à l'épaisseur totale de la période, elle ne nous permet pas de connaître l'épaisseur respective d'InAs et de GaSb. Il faut donc au moment de la modélisation supposer que l'on peut avoir un erreur sur l'épaisseur relative des matériaux. Cette erreur potentielle sera prise en compte lors de la comparaison des valeurs d'énergie de bande interdite modélisées et mesurées.

### 2.3.3 Choix des paramètres matériaux

Pour déterminer la valeur des paramètres matériaux permettant d'obtenir la meilleure correspondance entre énergie de bande interdite mesurée et calculée, j'introduis le paramètre d'analyse  $\chi^2$  qui devra être minimisé :

$$\chi^2 = \frac{1}{N} \sum_n |E_n^{\text{gap théorique}} - E_n^{\text{gap expérimental}}|^2 \quad (2.13)$$

Où N est le nombre de points où l'on réalise la comparaison entre les points théoriques et les points expérimentaux. Le choix de la valeur optimale du paramètre

se fera à la valeur minimum de  $\chi^2$ .

La modélisation optimale s'obtient avec les valeurs suivantes :

- Bandoffset InAs/GaSb = 545 meV
- Bandoffset InSb/GaSb = -20 meV
- Potentiel de déformation des bandes de conduction  $a_c = -5,08\text{eV}$  et  $b = -1,8\text{eV}$

Notons que ces valeurs sont proches des valeurs recommandées par Vurgaftman *et al.*

De plus, on a un écart possible de plus ou moins 1 MC dans l'épaisseur de la période lors de la réalisation des échantillons. J'ai donc intégré, en trait pointillé sur la figure 2.17, les valeurs des modélisation des énergies de bande interdite au niveau des points de mesure dans le cas de cette erreur. Dans le cas d'un SR InAs-rich (7 MC d'InAs/4 MC de GaSb) le trait plein représente les SR qui ont un rapport  $R=1.75$  et les traits pointillés représentent la modélisation de SR de rapport  $R=6/4=1,5$  et  $R=8/4=2$ . Pour les SR symétriques (10 MC d'InAs/10 MC de GaSb), le trait plein modélise les SR de rapport  $R=1$  et les traits pointillés représentent la modélisation de SR de rapport  $R=9/10=0,9$  et  $R=11/10=1,1$ . Enfin, de la même manière, les SR GaSb-rich (10 MC d'InAs/19 MC de GaSb) sont représentés en trait plein par un rapport  $R=10/19=0.526$  et les traits pointillés représentent la modélisation de SR de rapport  $R=10/20=0,5$  et  $R=10/18=0,556$ .

Sur la figure 2.17, la modélisation des énergies de bande interdite à 80K est très proche des points de mesures. De plus, les points sont tous compris dans l'intervalle défini par l'erreur possible d'1 MC sur l'épaisseur de période des SR. Nous remarquons également que mon calcul a modélisé des énergies de bande interdite pour des SR de faible épaisseur de période. Les valeurs des bandoffsets et des potentiels de déformation choisis seront donc utilisés de manière systématique dans toutes les modélisations suivantes présentées dans ce mémoire.

Les mesures présentées sur la figure 2.17 ont été réalisées à 80K, il faut maintenant comparer l'évolution de l'énergie de bande interdite avec la température pour fixer les paramètres de Varshni du GaSb. Or, la figure 2.18 montre que l'on obtient une comparaison satisfaisante entre modélisation et expérience d'un SR GaSb-rich (9,5 MC d'InAs / 22,5 MC de GaSb) de ratio  $R \approx 0,42$ , légèrement plus faible que la structure GaSb-rich classique (10 MC d'InAs / 19 MC de GaSb), et ceci en utilisant exactement les paramètres de Varshni préconisés par Vurgaftman *et al* ( $E_0(\text{OK}) = 0,812\text{eV}$ ,  $\alpha = 417\text{meV} \cdot \text{K}^{-1}$  et  $\beta = 140\text{K}$ ).

Je présente sur la figure 2.19 l'évolution de l'énergie de bande interdite en fonction de la température des trois structures SR étudiées et celle d'un SR symétrique (7 MC d'InAs / 7 MC de GaSb).

Les résultats calculés pour l'évolution en température de l'énergie de bande interdite ne correspondent pas aux résultats expérimentaux présentés dans la thèse de Rachid



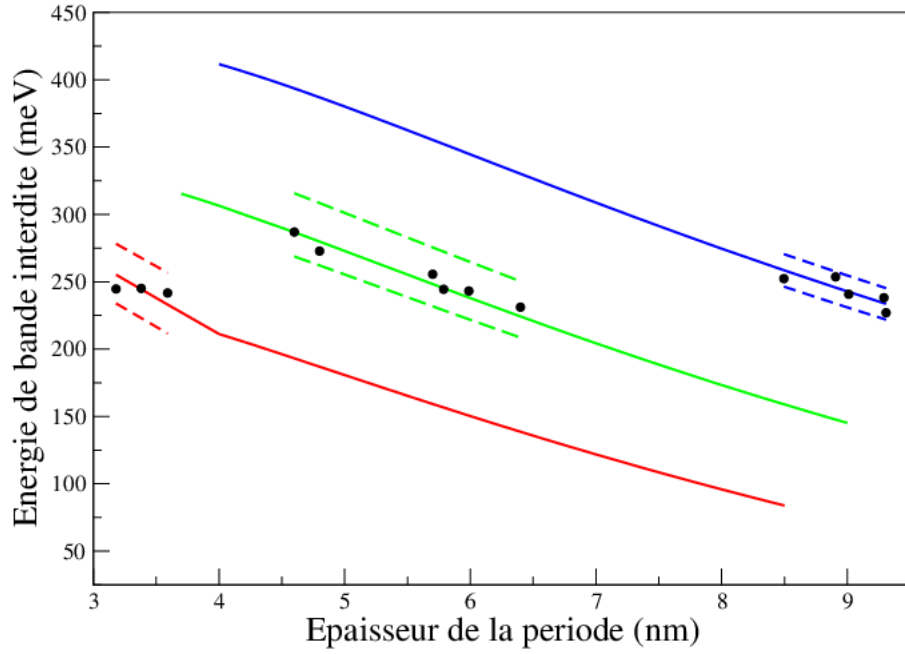


FIGURE 2.17: Énergie de bande interdite calculée (traits pleins) et mesurée (points) à 80K fonction de l'épaisseur des SR InAs-rich (rouge), symétrique (vert) et GaSb-rich(bleu). Les traits pointillés sont les valeurs extrêmes du calcul dans le cas d'une erreur de plus ou moins une MC sur l'épaisseur de la période de l'échantillon.

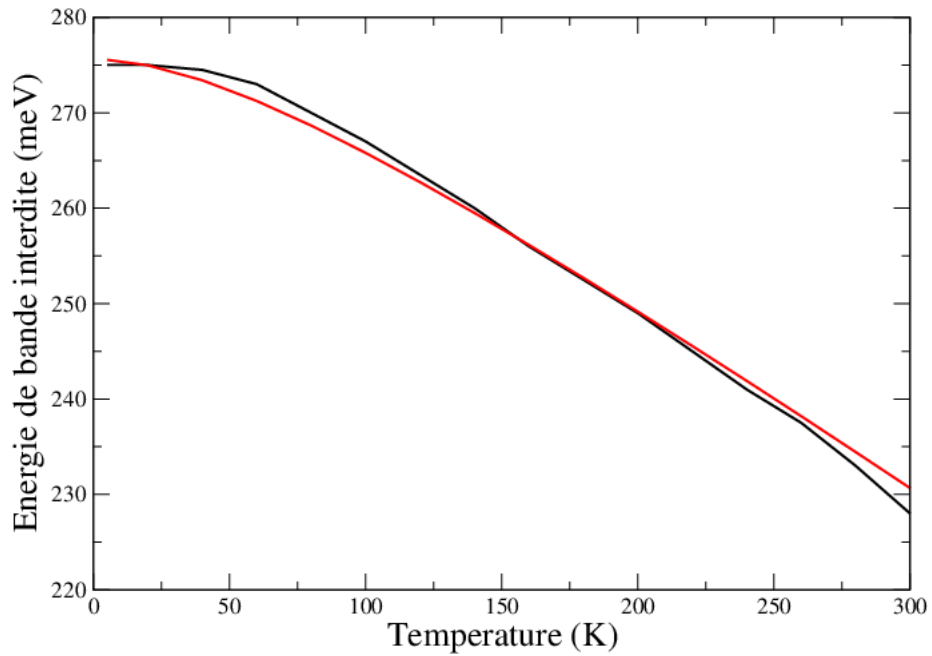


FIGURE 2.18: Énergie de bande interdite calculée (rouge) et mesurée (noir) fonction de la température d'un SR GaSb-rich (9,5 MC d'InAs/22,5 MC de GaSb).

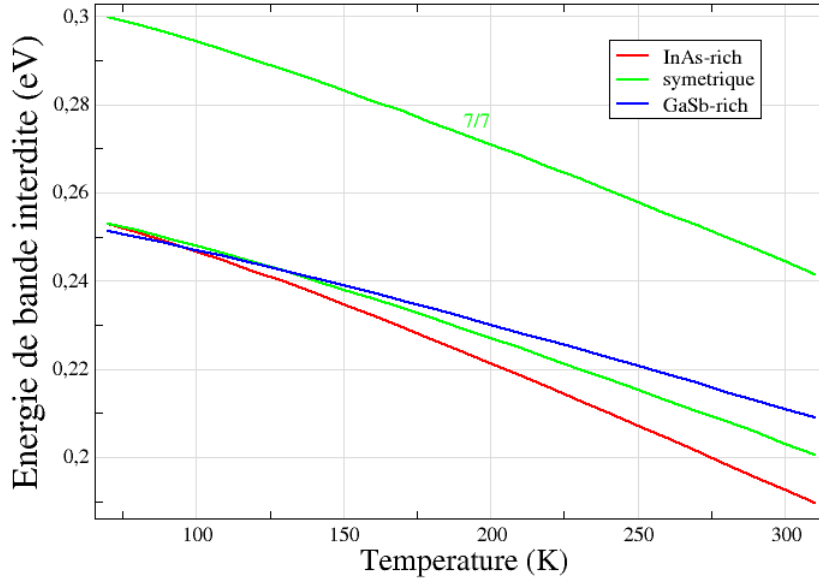


FIGURE 2.19: Énergie de bande interdite théorique en fonction de la température pour les trois structures étudiées et pour un SR symétrique (7 MC d'InAs / 7 MC de GaSb).

Taalat [Taalat, 2013] notamment pour les SR InAs-rich et symétriques (figure 2.20 a). Les travaux se poursuivent afin de comprendre cet écart et de mieux décrire l'évolution de l'énergie de bande interdite du SR en fonction de la température. Nous avons vu dans la partie 2.2.3 que les paramètres  $a_c$  et  $b$  avaient été optimisés à 80K. Il est possible qu'il faille prendre en compte l'évolution de ces paramètres avec la température pour mieux décrire leur influence sur les énergies de bandes interdite.

Rachid Taalat présente aussi dans son mémoire des résultats de différentes structures SR symétriques et montrent que toutes les structures SR symétriques ont les mêmes paramètres de Varshni (figure 2.20 b). J'ai donc rajouté l'évolution en température d'un SR symétrique (7 MC d'InAs / 7 MC de GaSb) sur la figure. Je retrouve bien le fait que, pour un SR symétrique, les paramètres de Varshni sont les mêmes quelle que soit l'épaisseur de la période.

Toutes ces comparaisons valident donc l'utilisation de notre modèle **kp** 18 bandes pour modéliser les SR InAs/GaSb de différentes épaisseurs à 80K. Sans prise en compte particulière des interfaces, l'augmentation du nombre de bandes prises en compte dans le calcul a suffi à modéliser l'énergie de bande interdite des trois types de SR InAs/GaSb dans le MWIR par ajustement du bandoffset. L'étude se poursuit afin de mieux rendre en compte de l'évolution des énergies de bande interdite en fonction de la température, notamment pour les SR symétriques et InAs-rich.

Cependant, mes résultats de modélisation ont ici été validés sur des grandeurs

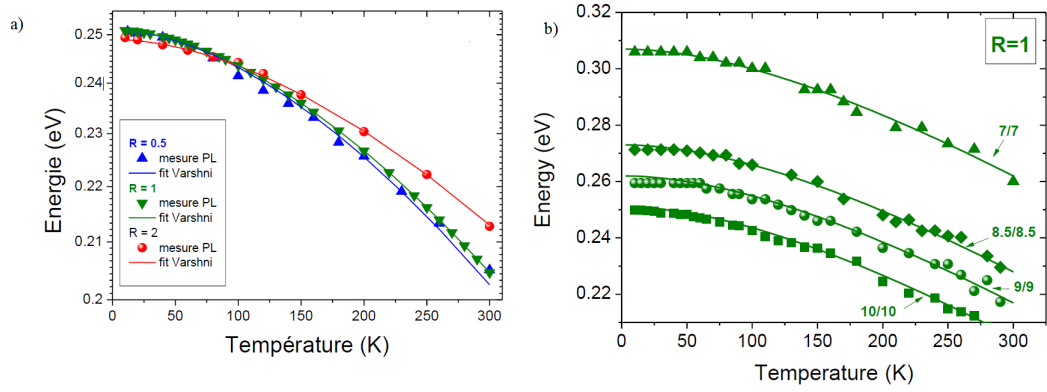


FIGURE 2.20: a) Énergies de bande interdite mesurées en fonction de la température pour les trois structures étudiées b) Énergies de bande interdite mesurées en fonction de la température pour différents SR symétriques (figures issues de [Taalat, 2013]).

physiques qui contiennent intrinsèquement peu d'information : uniquement la différence d'énergie de la bande de valence et de la bande de conduction en centre de zone de Brillouin. Je n'ai donc actuellement pas d'éléments de comparaison avec l'expérience pour l'ensemble des sorties de mon code, c'est-à-dire l'ensemble de la structure de bande et les fonctions d'onde. Il faut donc maintenant s'intéresser à une autre grandeur physique, le coefficient d'absorption, qui nous permettra d'obtenir cette comparaison et ainsi conclure sur la capacité de notre modèle à représenter les propriétés optiques des SR InAs/GaSb.

## 2.4 MODÉLISATION DU COEFFICIENT D'ABSORPTION

Le coefficient d'absorption est la grandeur physique du détecteur SR que j'ai choisi pour réaliser une comparaison plus complète entre les résultats de mon code et des résultats expérimentaux. En effet, comme on le verra par la suite, c'est une grandeur physique qui repose sur la structure de bande de l'ensemble de la zone de Brillouin et sur les fonctions d'onde. C'est donc en s'appuyant sur cette figure que l'on pourra conclure sur la fiabilité de notre modélisation et sa capacité prédictive pour les SR. De la même manière que pour l'énergie de bande interdite, je commencerai par une présentation générale du calcul du coefficient d'absorption. Ensuite, après avoir décrit mes mesures du coefficient d'absorption, je réaliserai une comparaison entre ces expériences et mon modèle. Enfin, je conclurai sur une analyse des résultats de modélisation du coefficient d'absorption pour les trois structures étudiées.

### 2.4.1 Le calcul de l'absorption

Le coefficient d'absorption est une valeur macroscopique de notre système (et donc mesurable), il faut alors faire le lien avec les valeurs microscopiques que sont la structure de bande et les fonctions d'onde. Dans un premier temps, je vais donc m'intéresser à l'origine du coefficient d'absorption et à son lien avec la susceptibilité électrique. Je présenterai ensuite le calcul de la susceptibilité électrique à l'aide de la structure de bande et des fonctions d'onde.

La susceptibilité électrique dans un milieu isotrope est une grandeur qui caractérise la polarisation créée par un champ électrique dans ce milieu :

$$\vec{P} = \epsilon_0 \chi \vec{E} \quad (2.14)$$

Où  $\vec{P}$  est le vecteur polarisation,  $\chi$  la susceptibilité électrique,  $\vec{E}$  le champ incident et  $\epsilon_0$  la constante diélectrique du vide.

L'induction électrique  $\vec{D}$  est définie par :

$$\vec{D}(\vec{r}, t) = \epsilon_b \vec{E}(\vec{r}, t) + \vec{P}(\vec{r}, t) \quad (2.15)$$

Où  $\epsilon_b$  est la constance diélectrique du milieu où a lieu l'absorption, on a alors dans le domaine fréquentiel :

$$\vec{D}(\vec{r}, \omega) = \epsilon(\vec{r}, \omega) \vec{E}(\vec{r}, \omega) \quad (2.16)$$

$$\epsilon(\vec{r}, \omega) = \epsilon_b + \epsilon_0 \chi(\vec{r}, \omega) \quad (2.17)$$

Ces deux équations nous donnent le lien entre la susceptibilité électrique et la permittivité diélectrique. Ensuite, pour comprendre la suite du calcul de l'absorption, il faut s'intéresser à la propagation de la lumière dans un milieu qui sera dans notre cas le SR. La résolution de ce problème se fait en repartant des équations des Maxwell. On prend dans notre cas, comme solution des équations de Maxwell, des ondes planes progressives de la forme :

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} + \omega t)} \quad (2.18)$$

Le détail de la suite du calcul est présenté en annexe C. Nous nous intéressons ici au principal résultat qui nous permet d'arriver au lien entre absorption et susceptibilité électrique, à savoir l'équation suivante :

$$k^2 = \omega^2 \mu_0 \epsilon \quad (2.19)$$

qui est la relation de dispersion dans un milieu isotrope. le nombre d'onde vaut alors  $k = \omega \sqrt{\mu_0 \epsilon}$ . En définissant alors l'indice de réfraction  $n = \sqrt{\frac{\mu \epsilon}{\mu_0 \epsilon_0}}$  (avec  $\mu = \mu_0$  car on suppose notre milieu non magnétique), on a alors :

$$k = \frac{\omega}{c} n \quad (2.20)$$

La permittivité étant complexe  $\epsilon = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$ , on peut exprimer  $k$  en fonction des termes de l'indice de réfraction complexe  $\tilde{n}(\omega) = n(\omega) + i\kappa(\omega)$  :

$$k = \frac{\omega}{c} [n(\omega) + i\kappa(\omega)] \quad (2.21)$$

Si maintenant on réinjecte l'équation ci-dessus dans notre équation 2.18 de l'onde plane progressive, on obtient :

$$\begin{aligned} \vec{E}(\vec{r}, t) &= \vec{E}_0 e^{i \frac{\omega}{c} (n(\omega) + i\kappa(\omega)) r} e^{i \omega t} \\ &= \vec{E}_0 e^{-\frac{\omega}{c} \kappa(\omega) r} e^{i \frac{\omega}{c} n(\omega) r} e^{i \omega t} \end{aligned} \quad (2.22)$$

$e^{i\frac{\omega}{c}n(\omega)r}$  est le terme de l'onde qui se propage,  $e^{-\frac{\omega}{c}\kappa(\omega)r}$  est le terme d'extinction de l'onde. Pour l'intensité de l'onde, en  $E^2$ , on définit alors le coefficient d'absorption  $\alpha = 2\frac{\omega}{c}\kappa$ . On peut alors en déduire la relation entre susceptibilité optique et coefficient d'absorption en utilisant 2.17 et la définition de l'indice de réfraction :

$$\begin{aligned}\alpha &= 2\frac{\omega}{c}\kappa = 2\frac{\omega}{c}\text{Im}[n] = 2\frac{\omega}{c}\text{Im}\left[\sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon_0}}\right] \\ &= 2\frac{\omega}{c}\text{Im}\left[\sqrt{\frac{\epsilon_b}{\epsilon_0} + \chi(\omega)}\right] = 2\frac{\omega}{c}n_r\text{Im}\left[\sqrt{1 + \frac{\epsilon_0}{\epsilon_b}\chi(\omega)}\right] \\ &\approx 2\frac{\omega}{c}n_r\text{Im}\frac{1}{2}\left[1 + \frac{\epsilon_0}{\epsilon_b}\chi(\omega)\right] \\ \alpha(\omega) &= \frac{\omega}{n_rc\epsilon_0}\text{Im}[\epsilon_0\chi(\omega)]\end{aligned}\quad (2.23)$$

où  $n_r = \sqrt{\frac{\epsilon_b}{\epsilon_0}}$  est la constante diélectrique du milieu de propagation de l'onde plane (dans notre cas on prendra celle du substrat : le GaSb, qui est assez proche de celle du SR [Steveller *et al.*, 2014]). Avec l'équation 2.23 on a le lien entre coefficient d'absorption et susceptibilité électrique.

Le formule de la susceptibilité calculée à l'aide des paramètres microscopiques (structure de bande et fonctions d'onde) est obtenue grâce au formalisme de la matrice densité, en étudiant l'interaction entre un système quantique à deux niveaux et une onde plane électromagnétique.

Le calcul est réalisé sur l'ensemble de la première zone de Brillouin, qui a été discrétisée en point  $\vec{k}$ , la somme du calcul se fait sur l'ensemble de ces points. Dans le cas du SR, l'absorption est interbande, aussi l'indice  $i$ , représentant l'état initial, parcourt les bandes de valence et l'indice  $f$ , représentant l'état final, parcourt les bandes de conduction :

$$\epsilon_0\chi(\hbar\omega) = \frac{e^2}{m_0^2} \frac{2}{V} \sum_{i,f,\vec{k}} \frac{1}{\omega_k} |\langle \Psi_i^*(\vec{k}) | p | \Psi_f(\vec{k}) \rangle|^2 \delta((E_f(\vec{k}) - E_i(\vec{k})) - \hbar\omega) (f_v(E_i(\vec{k})) - f_c(E_f(\vec{k}))) \quad (2.24)$$

Où  $(E_f(\vec{k}); \Psi_f(\vec{k}))$  et  $(E_i(\vec{k}); \Psi_i(\vec{k}))$  sont les couples énergie de bande et fonction d'onde impliquées dans la transition à un vecteur  $\vec{k}$  donné et calculés à l'aide de la méthode kp.  $V$  est le volume de la cellule élémentaire.

$\hbar\omega_k$  est la fréquence de résonance de la transition, i.e.  $\hbar\omega_k = E_f(\vec{k}) - E_i(\vec{k})$ .

$f_{v/c}(E(\vec{k}))$  est la statistique de Fermi pour un trou/électron qui, pour un niveau de Fermi  $E_F$ , est égale à :

$$f_c(E(\vec{k})) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E-E_F}{k_b T}}} \quad ; \quad f_v(E(\vec{k})) = \frac{1}{1 + e^{-\frac{E-E_F}{k_b T}}} \quad (2.25)$$

Où  $k_b$  est la constante de Boltzmann.

En conclusion, l'équation 2.24 nous permet de calculer la susceptibilité électrique à l'aide des fonctions d'onde et de la structure de bande de notre SR. L'équation 2.23 nous permet ensuite de déterminer l'absorption. On a donc tout ce qu'il faut pour faire le lien entre les propriétés intrinsèques et microscopiques du SR que l'on

a calculé à l'aide de la méthode **kp**, fonctions d'onde et structure de bande, et une propriété macroscopique du SR, le coefficient d'absorption, qui est mesurable expérimentalement.

#### 2.4.2 L'élargissement des bandes

Notre modèle du calcul du coefficient d'absorption considère que les bandes qui participent à l'absorption d'un photon n'ont pas d'épaisseur. Cela s'exprime d'un point de vue mathématique par l'utilisation de la fonction dirac dans l'équation 2.24 :  $\delta((E_f(\vec{k}) - E_i(\vec{k})) - \hbar\omega)$ .

On sait cependant que toutes imperfections ou interactions extérieures à notre hamiltonien va élargir les niveaux d'énergie. Cet élargissement est intégré au calcul par le remplacement de la fonction  $\delta$  par une fonction Lorentzienne de largeur  $\Gamma$  :

$$\delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \rightarrow \frac{\Gamma 2\pi}{(E_f - E_i - \hbar\omega)^2 + (\Gamma/2)^2} \quad (2.26)$$

On obtient donc la formule suivante pour la susceptibilité :

$$\epsilon_0 \chi(\hbar\omega) = \frac{e^2}{m_0^2} \frac{2}{V} \sum_{i,f,\vec{k}} \frac{1}{\omega_k} \frac{|< \Psi_i^*(\vec{k}) | p | \Psi_f(\vec{k}) >|^2}{(E_f(\vec{k}) - E_i(\vec{k})) - \hbar\omega - i\Gamma(\omega)} (f_h(E_i(\vec{k})) - f_e(E_f(\vec{k}))) \quad (2.27)$$

On retrouve bien une fonction lorentzienne pour le coefficient d'absorption en prenant la partie imaginaire de la susceptibilité (selon l'équation 2.23). L'élargissement  $\Gamma$  est supposé variable avec l'énergie du photon incident, et s'écrit sous cette forme d'après [Klipstein *et al.*, 2013] :

$$\Gamma(\omega) = \begin{cases} \Gamma_0 & \text{si } \omega < \omega_{gap} \\ \Gamma_0 + \gamma(\omega - \omega_{gap}) & \text{si } \omega > \omega_{gap} \end{cases} \quad (2.28)$$

où  $\omega_{gap}$  est définie tel que  $\hbar\omega_{gap} = E_{gap}$ . Les paramètres  $\Gamma_0$  et  $\gamma$  seront déterminés par comparaison avec les mesures expérimentales.

### 2.5 COMPARAISON ENTRE EXPÉRIENCE ET MODÈLE POUR L'ABSORPTION

Le choix des structures utilisées pour la comparaison s'est porté sur des SR GaSb-rich. En effet, les nombreuses structurations présentes dans son spectre d'absorption, associées à des transitions inter-minibandes, sont des informations visibles qui aideront à la comparaison.

#### 2.5.1 Mesure du coefficient d'absorption à 80K

J'ai réalisé les mesures du coefficient d'absorption à l'ONERA sur différents échantillons fabriqués à l'IES. Pour obtenir des courbes précises en fonction de la température, il a fallu mettre en place un banc de mesure spécifique. Une procédure de croissance particulière a également été établie avec l'IES afin de mieux connaître le ratio InAs/GaSb dans la période des échantillons réalisés.

#### 2.5.1.1 Le banc de mesure

Le coefficient d'absorption est obtenu à partir des spectres de transmission. Ces derniers sont mesurés à l'aide d'un FTIR à 80K.

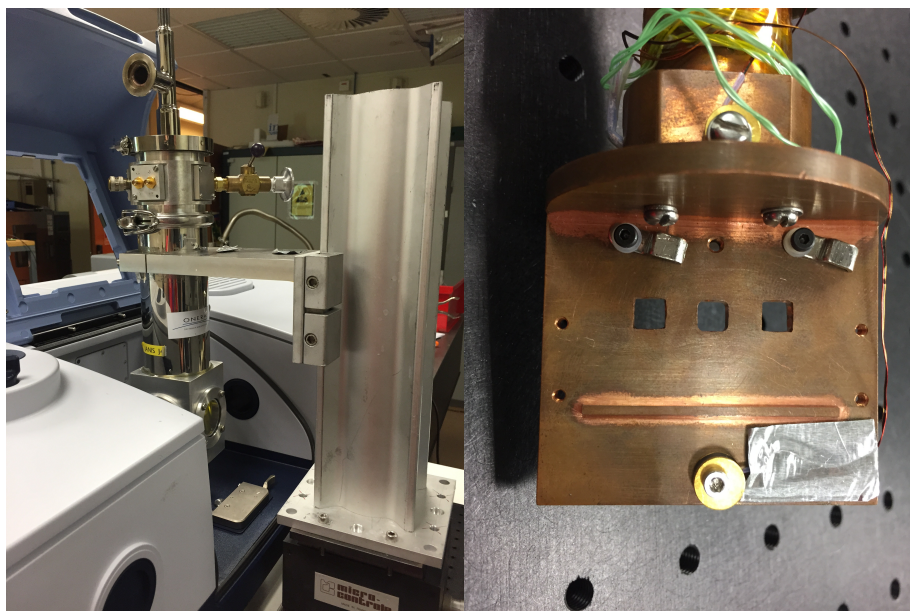


FIGURE 2.21: Photographie du banc de mesure pour déterminer le spectre d'absorption à différentes températures des échantillons SR.

Pour réaliser ces mesures à des températures cryogéniques, l'échantillon est placé dans un cryostat à circulation sur un doigt froid. Ce dernier est refroidi par conduction grâce à de l'azote ou de l'hélium liquide. Il est important de maintenir un vide important ( $10^{-5}$  Pa) dans le cryostat pour éviter la condensation d'eau ou la formation de givre sur les fenêtres et l'échantillon lorsque l'on descend en température. Les fenêtres du cryostat sont en ZnSe, un matériau transparent dans l'infrarouge. Le cryostat avec l'échantillon est alors placé dans le FTIR qui mesure son spectre de transmission. Une photographie du banc est présentée sur la figure 2.21.

Cependant, la transmission se fait au travers du SR mais aussi du substrat. Il faut donc s'affranchir de l'influence de ce dernier. Pour ce faire, je réalise deux mesures de transmission successives. Comme montré sur le schéma (figure 2.22) en déplaçant le cryostat dans le faisceau du FTIR, je réalise une première mesure sur l'échantillon comportant le SR et le substrat, une deuxième sur le substrat seul. Le rapport de ces deux mesures donne la transmission du SR seul. Cependant le choix du substrat est important pour permettre d'extraire le coefficient d'absorption avec précision.

#### 2.5.1.2 Influence du substrat

Il faut dans un premier temps, faire attention à ce que les substrats GaSb, sur lesquels sont réalisés les échantillons, soient transparents dans la gamme de longueur d'onde qui nous intéresse. Sur la figure 2.23 sont présentées des mesures de transmission à 300K d'échantillons de GaSb dopés p et d'échantillons dopés n. La transmission du



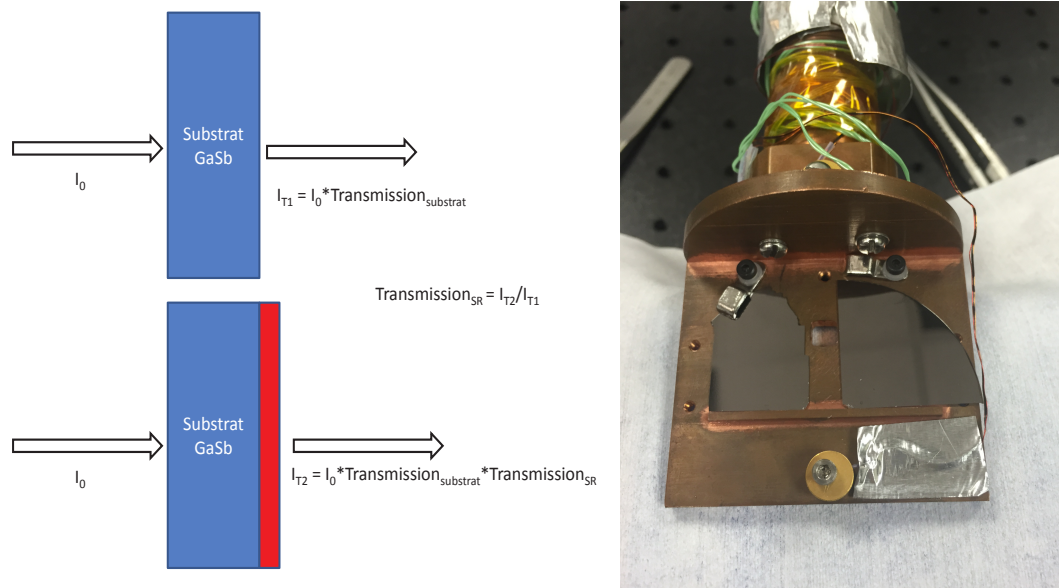


FIGURE 2.22: Représentation schématique de la méthode expérimentale de la mesure de transmission du SR et photographie du porte échantillon développé à cet effet, avec les deux types de structures.

substrat est limité aux hautes énergies par l'énergie de bande interdite du matériau et aux basses énergies par l'absorption aux porteurs libres. Les écarts que l'on observe entre dans le spectre de transmission entre deux échantillons d'un même type (n ou p) sont dus à une différence de dopage entre ces échantillons. Cependant, il apparaît que seuls les échantillons de GaSb dopés n sont utilisables pour les mesures de transmission.

Une mesure du spectre de transmission sur un substrat de référence de GaSb a été réalisée pour servir de mesure de base afin d'extraire la transmission des structures SR. Or, nous nous sommes rendu compte que la forme de la transmission du substrat est fortement influencée par le dopage du GaSb : on observe une forte différence de forme dans les spectres de transmission (figure 2.24). Ce substrat ne peut donc pas servir pour extraire la transmission du SR. Aussi pour extraire précisément cette dernière il est important que le substrat utilisé pour servir de mesure de référence soit le même que celui sur lequel est réalisé le SR.

Deux solutions ont alors été proposées pour s'affranchir efficacement de l'influence du substrat. La première solution est destructive : on introduit une couche d'arrêt entre le SR et son substrat en InAsSb de 150 nm. Une fois la mesure de transmission du SR et du substrat réalisée, on retire le SR à l'aide d'une gravure chimique sélective pour réaliser une mesure de transmission sur le substrat seul. La deuxième méthode consiste à ne réaliser la croissance de l'échantillon que sur un quart de wafer, le reste du wafer servant de substrat de référence. Avec ce nouveau protocole, on observe que les spectres de transmission sont alors comparables (figure 2.25). Le rapport de ces spectres nous donne alors la transmission du SR seul (figure 2.26). Je me suis alors affranchi de l'influence du substrat mais également des effets de l'atmosphère,



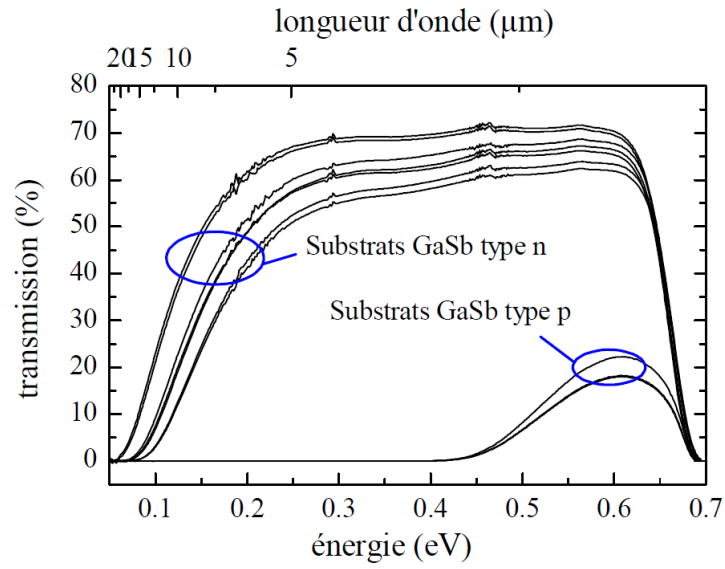


FIGURE 2.23: spectres de transmission à 300K de substrats de GaSb pour différents dopages.  
Figure issue de [Rodriguez, 2005]

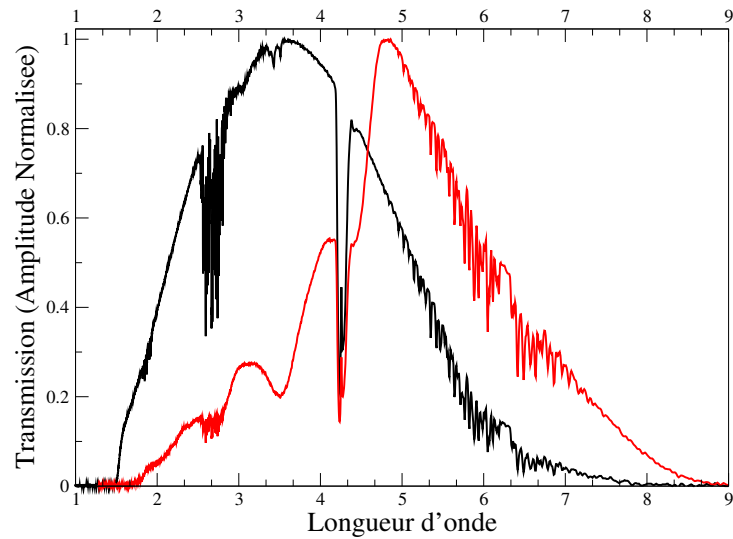


FIGURE 2.24: Spectres de transmission du substrat de GaSb référent et d'un SR GaSb-rich (9,5 MC d'InAs / 22,5 MC de GaSb) sur son substrat GaSb.

qui sont responsables des oscillations sur les spectres de transmission de la figure 2.25 aux alentours de  $2,7\mu\text{m}$  et entre  $5\mu\text{m}$  et  $7\mu\text{m}$  et du pic d'absorption du  $\text{CO}_2$  à  $4,2\mu\text{m}$ .

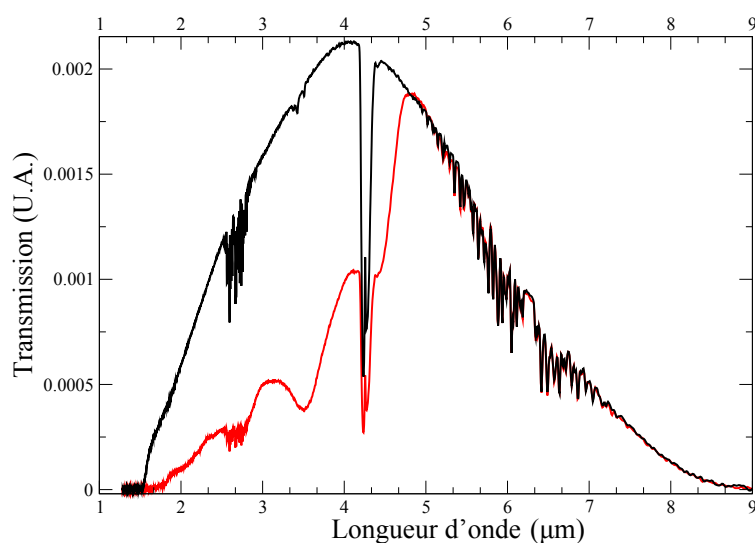


FIGURE 2.25: Spectres de transmission à 80K d'un échantillon de SR GaSb-rich (9,5 MC d'InAs / 22,5 MC de GaSb) sur son substrat GaSb dopé n (en rouge) et du substrat seul (en noir).

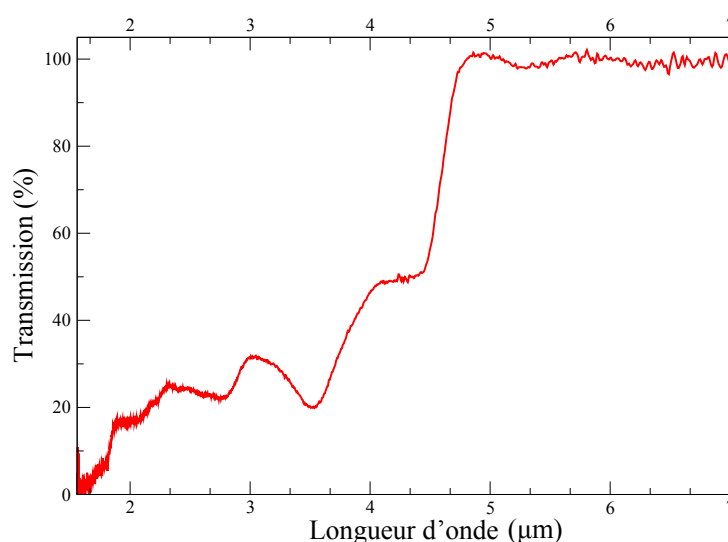


FIGURE 2.26: Spectre de transmission à 80K d'un SR GaSb-rich (9,5 MC d'InAs / 22,5 MC de GaSb).

Le protocole le plus simple pour obtenir la transmission du SR seul est de ne réaliser la croissance du SR que sur un quart du wafer. C'est donc cette méthode qui sera à l'avenir utilisée pour obtenir les spectres d'absorption des échantillons réalisés à l'IES.

### 2.5.1.3 Détermination du coefficient d'absorption

Une fois la mesure de transmission du SR seul obtenue, j'utilise la loi de Beer-Lambert pour remonter à l'absorption du SR :

$$I_{\text{transmis}}(z, \lambda) = I_{\text{incident}}(\lambda) * e^{-\alpha(\lambda)z} \quad (2.29)$$

Connaissant l'épaisseur de l'échantillon, j'obtiens le coefficient d'absorption  $\alpha$  en fonction de la longueur d'onde du photon incident (figure 2.27).

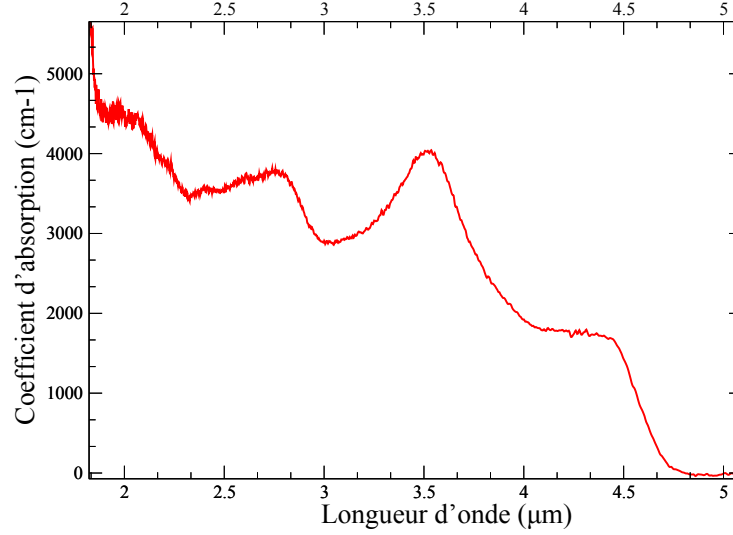


FIGURE 2.27: Coefficient d'absorption à 80K d'un SR GaSb-rich (9,5 MC d'InAs / 22,5 MC de GaSb).

On peut observer sur la figure 2.27 que le spectre du SR GaSb-rich (9,5 MC d'InAs / 22,5 MC de GaSb) présente comme attendu de nombreuses structurations du fait de son comportement 2D. La forme du coefficient d'absorption présente cependant des pics plus que les "marches d'escalier" attendues dans une hétérostructure 2D, cette forme de pics sera expliquée par la suite à l'aide de notre code de modélisation.

Le CHTM a réalisé en novembre 2014 des mesures de coefficient d'absorption sur une structure GaSb-rich (9 MC d'InAs / 15 MC de GaSb) avec une longueur d'onde de coupure de 3,9 μm à 80K [Tian *et al.*, 2014]. Ils obtiennent une mesure comparable à la notre avec des structurations visibles sur le spectre, du fait, comme je l'ai expliqué pour les structure SR GaSb-rich, d'un comportement 2D. Ils obtiennent un niveau d'absorption dans le même ordre de grandeur que ma mesure, avec cependant un niveau maximum plus élevé (6000 cm⁻¹ au maximum). Il est intéressant de noter que l'épaisseur de période de leur échantillon ( $\approx 72 \text{ \AA}$ ) est plus faible que celle de mon échantillon ( $\approx 96 \text{ \AA}$ ), donc le recouvrement des fonctions d'onde de l'échantillon du CHTM est plus élevé, ce qui explique son plus haut niveau d'absorption.

### 2.5.2 Comparaison avec l'expérience et choix des paramètres d'élargissement de bande

Maintenant que j'ai les outils pour obtenir une comparaison exhaustive entre notre modèle et l'expérience, je peux fixer tous les paramètres de mon code et conclure sur

sa capacité à modéliser les structures SR InAs/GaSb à 80K.

Les mesures présentées jusqu'ici ont été réalisées pour un éclairage de l'échantillon par le dessus, c'est-à-dire pour une direction de propagation de la lumière incidente parallèle à l'axe de croissance. Comme le montre la figure 2.28a, dans le cas d'une direction de propagation parallèle à l'axe de croissance, la polarisation est perpendiculaire à l'axe de croissance. Une polarisation dans cette direction sera maintenant notée polarisation  $[1,0,0]$ . C'est donc cette polarisation que je vais utiliser dans mes calculs pour me comparer aux résultats expérimentaux. A l'inverse, dans le cas d'une direction de propagation perpendiculaire à l'axe de croissance, la polarisation est cette fois parallèle à l'axe de croissance (figure 2.28 b). Une polarisation dans cette direction sera maintenant notée polarisation  $[0,0,1]$ .

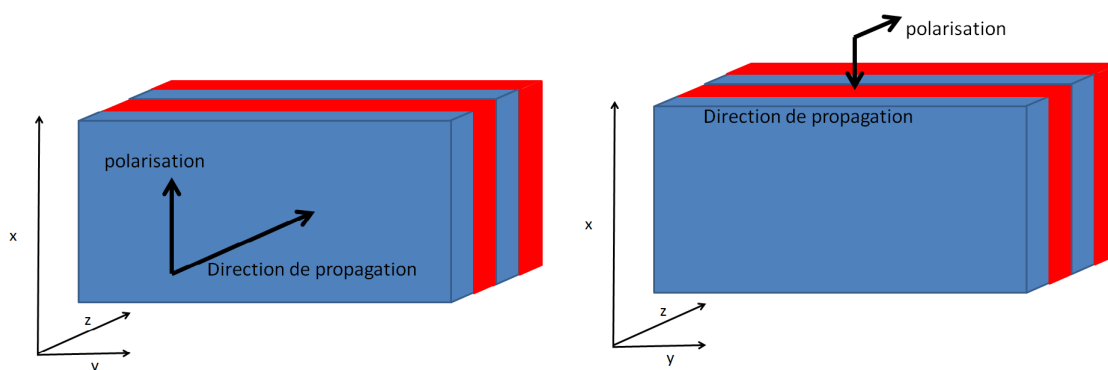


FIGURE 2.28: Schéma du champ incident sur une structure SR. a) La direction de propagation est dans la direction  $[0,0,1]$ , la polarisation est orientée lors du calcul dans la direction  $[1,0,0]$ . b) La direction de propagation est dans la direction  $[1,0,0]$ , la polarisation est orientée dans la direction  $[0,0,1]$ .

Les paramètres  $\Gamma_0$  et  $\gamma$  de l'élargissement de bande du modèle de l'absorption sont choisis pour avoir une bonne correspondance avec une courbe expérimentale de SR GaSb-rich (présenté sur la figure 2.27). Le paramètre  $\Gamma_0$  est fixé de manière à ce que la pente de la courbe modélisée au niveau du gap soit la même que celle mesurée. Ensuite, le paramètre  $\gamma$  est choisi pour que l'élargissement du pic du spectre d'absorption à 3.5eV corresponde à la mesure. Encore une fois, c'est la quantité d'information extractible des spectres d'absorption de SR GaSb-rich qui nous permet de fixer précisément ces paramètres. Les valeurs choisies pour obtenir la courbe de la figure 2.29 sont  $\Gamma_0 = 1,67\text{meV}$  et  $\gamma = 0,05\text{eV} \cdot \text{s}$ .

Sur la figure 2.29 sont présentées les courbes expérimentale et théorique du coefficient d'absorption. La comparaison est réalisée sur un échantillon SR GaSb-rich (9,5 MC d'InAs / 22,5 MC de GaSb) à 80K. J'ai explicité sur cette figure les contributions des différentes transitions qui constituent le spectre global d'absorption.

La première chose remarquable est que pour cette structure GaSb-rich, seule la première bande de conduction ( $E_1$ ) participe à l'absorption aux longueurs d'onde pour lesquelles le spectre a été mesuré. Les bandes de conduction plus hautes en énergie sont trop éloignées des bandes de valence pour contribuer à l'absorption. Les diffé-

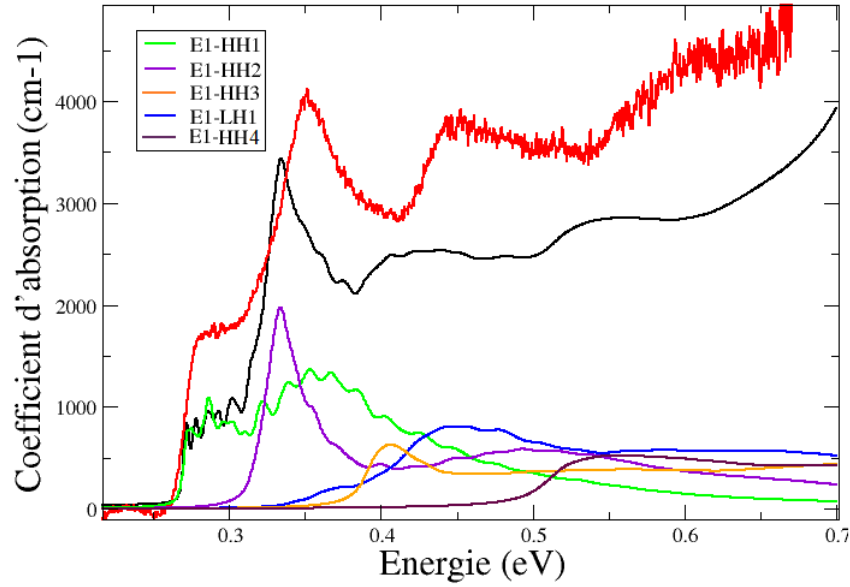


FIGURE 2.29: Coefficient d'absorption à 80K d'un échantillon GaSb-rich (9,5 MC d'InAs / 22,5 MC de GaSb) calculé (en noir) et mesuré (en rouge) pour une polarisation  $[1, 0, 0]$ . Sont aussi représentées les contributions des différentes transitions entre la première bande de conduction et les différentes bandes de valence.

rentes structurations du spectre sont dues à des transitions entre la première bande de conduction  $E_1$  et des bandes de trous lourds ( $HH_2$ ,  $HH_3$  et  $HH_4$ ). On peut également noter que la transition  $E_1$ - $HH_2$  donne lieu à un pic plutôt qu'à une marche sur la courbes d'absorption, la forme de marche étant attendue pour un matériau 2D (cf paragraphe 2.1.2).

Ceci est explicable par le fait que les trous dans une structure SR InAs/GaSb sont très confinés dans le GaSb et ont donc une forte masse effective dans la direction de croissance, notamment comparé à un matériau massif (comme expliqué dans la partie 2.1.2 de ce manuscrit).

Si on regarde la structure de bande (figure 2.30) d'un SR GaSb-rich, les bandes de trous lourds apparaissent comme plates dans la direction de croissance  $k_z$ , il y a donc une forte concentration de trous lourds peu étalée à une énergie donnée, créant ainsi une absorption intense au début des transitions entre la première bande de conduction et une bande de trou lourd.

On observe de plus que les transitions entre la bande  $E_1$  et une bande  $HH$  continuent à contribuer à l'absorption à de plus hautes énergies. Ceci vient du fait que dans l'autre direction  $k_{//}$  (i.e. perpendiculaire à la direction de croissance) il n'y a pas de confinement des trous. Les bandes de trous ont donc une forme plus proche d'une parabole qui est la forme classique d'une bande dans un matériau massif, comme montré sur la figure 2.30.

En conclusion, la forme du coefficient d'absorption est la somme de deux phénomènes :

- la contribution à l'absorption des transitions entre la bande d'électron  $E_1$  et les bandes  $HH$  dans la direction  $k_z$ , où leurs forts confinement fait apparaître un

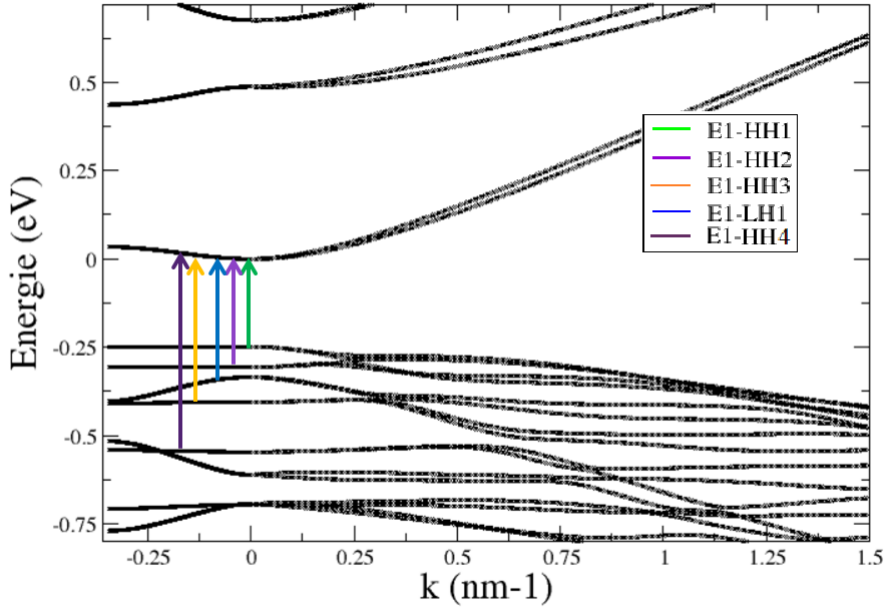


FIGURE 2.30: Structure de bande d'un SR GaSb-rich (9,5 MC d'InAs / 22,5 MC de GaSb), dans les directions  $[1,0,0]$  (valeurs positives de  $\vec{k}$ ) et  $[0,0,1]$  (valeurs négatives de  $\vec{k}$ ), i.e. la direction de croissance du SR.

pic d'absorption centré autour de la longueur d'onde donnée par la différence d'énergie entre la bande E1 et la bande HH.

- la contribution de ces transitions (E1-HH) dans la direction  $k_{//}$ , où la forme parabolique des bandes HH induit une absorption plus faible sur une plage en longueur d'onde plus large. Ce qui donne cette forme plate de ces transitions à plus haute énergie, au delà du "pic" au début de la transition.

Enfin, la bande HH2 étant éloignée dans la structure de bande des autres bandes de valence (figure 2.30), on a une forte absorption très localisée à l'énergie  $E_{E1} - E_{HH2} = 0,35\text{eV}$ . En effet, les autres transitions plus basses en longueur d'onde n'interviennent pas encore ce qui donne cette forme de pic, uniquement due à la transition E1-HH2, visible dans la forme globale du spectre d'absorption. Mon code est donc capable de représenter fidèlement la forme du coefficient d'absorption mesuré et permet même d'expliquer la forme particulière de ce spectre pour les SR GaSb-rich. Par contre, quantitativement, il persiste un léger désaccord entre mesure et simulation. Cet écart, qui peut être dû à une connaissance imparfaite du rapport R de la structure SR ou bien à l'utilisation d'un paramètre matériau non pertinent (comme un élément de matrice par exemple), est toujours en cours d'investigation lors de l'écriture de ce manuscrit.

En conclusion, j'ai validé la capacité d'un modèle **kp** 18 bandes à modéliser des structures SR InAs/GaSb. Le code va donc être utilisé pour mieux comprendre l'origine physique de l'absorption à 80K dans le MWIR des trois types de structures SR étudiées.

### 2.5.3 Résultats sur l'absorption

Pour comprendre la forme des coefficients d'absorption en fonction de la polarisation de la lumière, il faut s'intéresser aux contributions individuelles de chaque transition et comprendre que la forme de ces contributions est due :

- aux règles de sélection des transitions.
- à la dispersion selon  $\vec{k}$  des bandes de valence.
- au recouvrement des fonctions d'onde d'électron et de trou.

Pour un puit quantique avec un alignement de type III, lorsque la polarisation est dans la direction  $[0,0,1]$ , seule les transitions entre une bande de trous léger (LH) et une bande d'électron sont permises et lorsque la polarisation est dans la direction  $[1,0,0]$ , les transitions entre une bande de trous lourds et une bande d'électron contribuent majoritairement au coefficient d'absorption comparé aux transitions entre bande de trous légers et bande d'électron (voir [Bastard, 1988] p.255).

Premièrement, si on s'intéresse au coefficient d'absorption des trois structures SR étudiées pour une polarisation  $[1,0,0]$ , on peut voir sur la figure 2.31 la différence de comportement attendue entre les trois types de SR : le SR GaSb-rich (en bleu) a une absorption d'un matériau qui, comme on l'a vu précédemment, présente une structuration forte où sont visibles les transitions supérieures à l'énergie de bande interdite, alors que le SR InAs-rich (en rouge) présente une absorption semblable à celle d'un matériau 3D, en forme de  $\sqrt{E}$ . Le SR symétrique a un comportement intermédiaire entre matériau 2D et 3D. Les oscillations visibles proches de l'énergie de bande interdite sont n'ont pas de fondement physique et sont des résidus dus à l'intégration en  $\vec{k}$  pour le calcul de l'absorption.

Il est de plus visible que le niveau d'absorption dans un SR InAs-rich est plus élevé que dans un SR GaSb-rich ou symétrique, ce qui est logique car le recouvrement des fonctions d'onde d'électron et de trou dans un SR InAs-rich est supérieur à celui des fonctions d'onde dans un SR GaSb-rich. Entre  $3.5\mu\text{m}$  (soit  $0,35\text{eV}$ ) et  $4.5\mu\text{m}$  (soit  $0,28\text{eV}$ ), on obtient des valeurs de coefficient d'absorption entre  $4000$  et  $1500\text{cm}^{-1}$ , respectivement, ce qui est tout à fait comparable à l'absorption dans l'InSb ou dans le MCT. Ceci confirme que le SR InAs-rich est, du point de vue de l'absorption des photons incidents, le meilleur candidat en vue de réaliser un détecteur.

Des mesures de rendements quantiques ont été réalisées au sein de notre équipe [Giard, 2015]. Je présente sur la figure 2.32 les rendements quantiques mesurés d'un SR GaSb-rich et d'un SR symétrique superposés à mes calculs de coefficients d'absorption pour les mêmes structures. Les grandeurs ont été normalisées à 1 afin de faciliter les comparaisons.

On retrouve sur les rendements quantiques les pics dus à des transitions entre une bande d'électron et une bande de trous lourds. Ma modélisation du coefficient d'absorption retrouve bien la même longueur d'onde de coupure et la même longueur d'onde pour les transitions supérieures qui font apparaître ces pics :

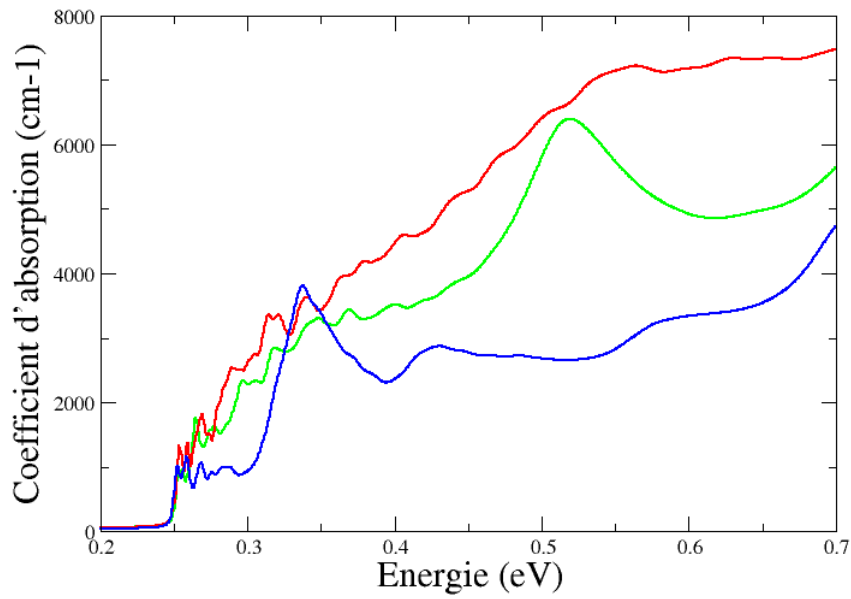


FIGURE 2.31: Spectre d'absorption calculé à une température de 80K pour un SR InAs-rich (rouge), symétrique (vert) et GaSb-rich (bleu) pour une polarisation dans la direction  $[1,0,0]$ , c'est-à-dire une propagation de l'onde le long de l'axe de croissance.

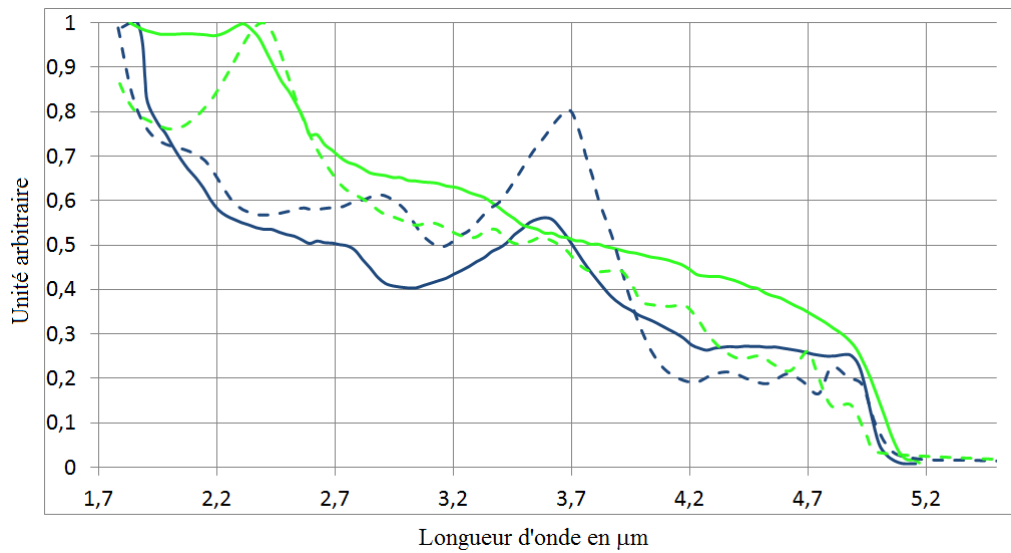


FIGURE 2.32: Coefficient d'absorption calculé pour une polarisation dans la direction  $[1,0,0]$  (trait pointillé) et réponse spectrale mesurée (trait plein) en fonction de la longueur d'onde à 77K pour un SR symétrique 10/10 (vert) et un SR GaSb-rich 10/19 (bleu).



- Dans le cas du SR GaSb-rich le pic très marqué à  $3,7\mu\text{m}$  est du, comme je l'ai montré précédemment, à une transition  $E1\text{-HH}2$  et le pic à  $2,9\mu\text{m}$  à une transition  $E1\text{-HH}3$ .
- Dans le cas du SR symétrique, la figure 2.33 montre que c'est la transition  $E1\text{-HH}2$  qui est responsable du pic à  $2,4\mu\text{m}$ .

Ces pics sont dus à la forte localisation des trous dans ces SR. De ce fait, les bandes de valence ont une faible dispersion en  $\vec{k}$  ce qui entraîne une forte localisation d'états dans la structure de bande et donc crée un pic dans le coefficient d'absorption.

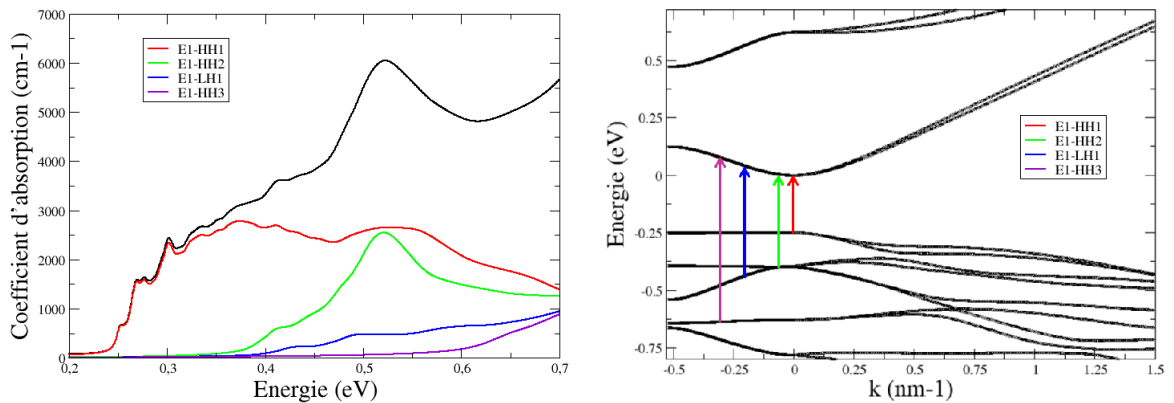


FIGURE 2.33: Coefficient d'absorption à 80K d'un échantillon symétrique (10 MC d'InAs / 10 MC de GaSb) calculé pour une polarisation  $[1, 0, 0]$ . Sont aussi représentées les contributions des différentes transitions entre la première bande de conduction et les différentes bandes de valence.

Enfin pour le SR InAs-rich, la figure 2.34 montre que la transition  $E1\text{-HH}1$  participe principalement à l'absorption aux énergies auxquelles le coefficient d'absorption est représenté. La transition  $E1\text{-HH}1$  domine l'ensemble des contributions sur la bande  $3\text{-}5\mu\text{m}$  (soit  $0,25\text{-}0,41\text{eV}$ ). La seconde contribution importante est celle de la transition  $E1\text{-LH}1$  qui augmente l'absorption sur la bande  $3\text{-}1,24\mu\text{m}$  ( $0,41\text{-}1\text{eV}$ ). La dernière contribution présentée sur la figure est celle de la transition  $E1\text{-HH}2$  qui reste faible comparée aux autres sur cette plage d'énergie. Les trous lourds étant fortement délocalisés dans une structure SR InAs-rich, les bandes de valence des trous lourds ne font pas apparaître une forte localisation d'états dans la structure de bande. C'est pourquoi, il n'y a pas de pics visibles dans le coefficient d'absorption du SR InAs-rich comme dans les SR GaSb-rich ou symétrique.

En conclusion, pour une polarisation dans la direction  $[1,0,0]$ , ce sont bien les transitions E-HH qui participent majoritairement au coefficient d'absorption, notamment pour les structures SR GaSb-rich et symétrique comme attendu d'après les règles de sélection dans un puits quantique. Pour les SR GaSb-rich et symétrique, la forte localisation des trous lourds entraîne une faible dispersion de leurs bandes en  $\vec{k}$  ce qui explique cette forme de coefficient d'absorption où apparaissent des pics. A l'inverse, dans un SR InAs-rich les trous lourds sont plus faiblement localisés entraînant une dispersion de leurs bandes plus importante en  $\vec{k}$ , le coefficient

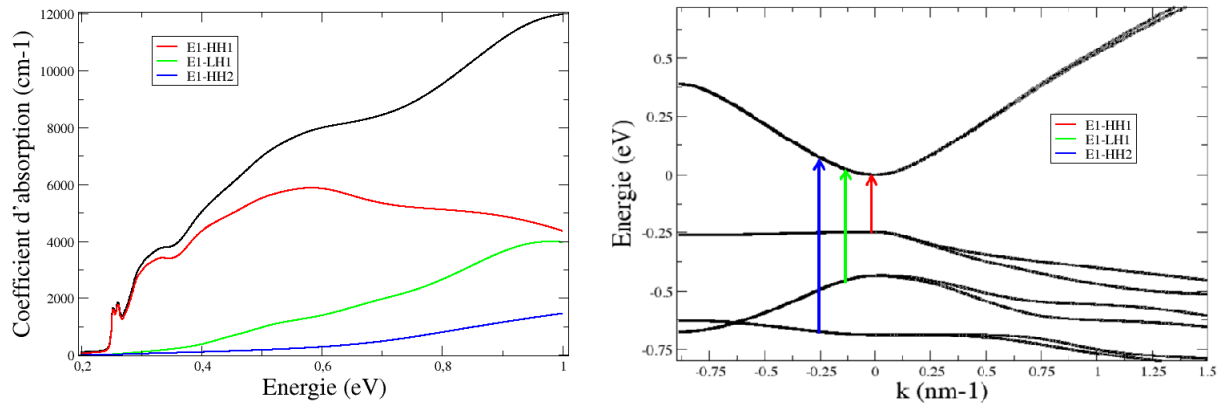


FIGURE 2.34: Coefficient d'absorption à 80K d'un échantillon InAs-rich (7 MC d'InAs / 4 MC de GaSb) calculé pour une polarisation  $[1, 0, 0]$ . Sont aussi représentées les contributions des différentes transitions entre la première bande de conduction et les différentes bandes de valence.

d'absorption ne présente alors pas de structuration.

Je vais maintenant présenter des coefficients d'absorption pour une direction du vecteur de polarisation dans la direction  $[0, 0, 1]$  comme montré sur la figure 2.28.

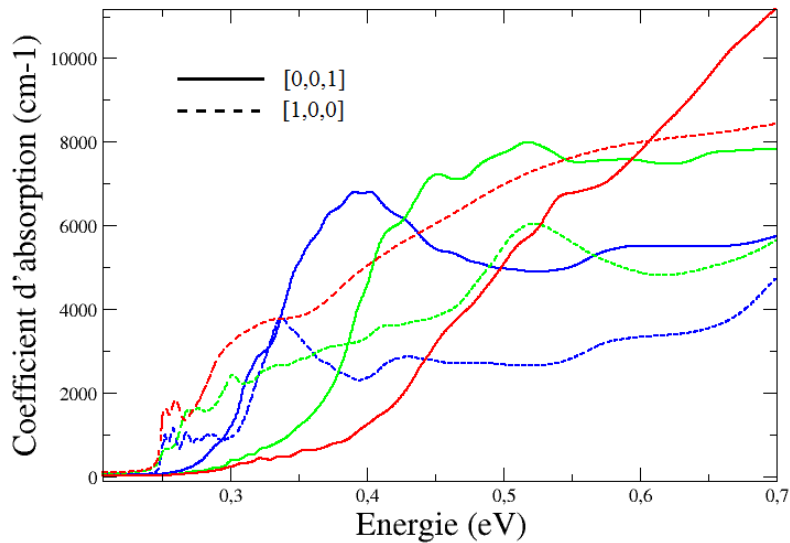


FIGURE 2.35: Coefficient d'absorption calculé à une température de 80K pour un SR InAs-rich (7 MC d'InAs / 4 MC de GaSb en rouge), symétrique (10 MC d'InAs / 10 MC de GaSb en vert) et GaSb-rich (10 MC d'InAs / 19 MC de GaSb en bleu) pour une polarisation de l'onde incidente orientée dans la direction  $[0,0,1]$  (trait plein) et  $[1,0,0]$  (trait pointillé).

Je rappelle que pour une polarisation de l'onde dans la direction  $[0,0,1]$ , seules les transitions E-LH sont permises. Cependant, sur les figure 2.36, 2.37 et 2.38 on peut voir que les transitions E1-HH participent au coefficient d'absorption. Ceci peut

venir du fait que la description de la bande en trou lourd n'est valable qu'en centre de zone de Brillouin ( $\vec{k} = \vec{0}$ ) et que la bande se couple à une bande de trous légers pour  $\vec{k} \neq \vec{0}$ . D'ailleurs, au début de transition E1-HH, la contribution est très faible (surtout en comparaison avec la contribution de cette transition dans la polarisation [1,0,0]), c'est-à-dire qu'en centre de zone de Brillouin la bande est bien décrite comme une bande de trous lourds et les transitions E1-HH sont donc interdites et ne participent pas à l'absorption pour des vecteurs  $\vec{k}$  proches de 0. Cependant, de manière générale pour les trois structures, on voit que dans cette direction de polarisation et du fait des règles de sélection, la transition E1-LH participe beaucoup plus au coefficient d'absorption que pour une polarisation [1,0,0], bien que la contribution de la transition E1-HH1 reste majoritaire.

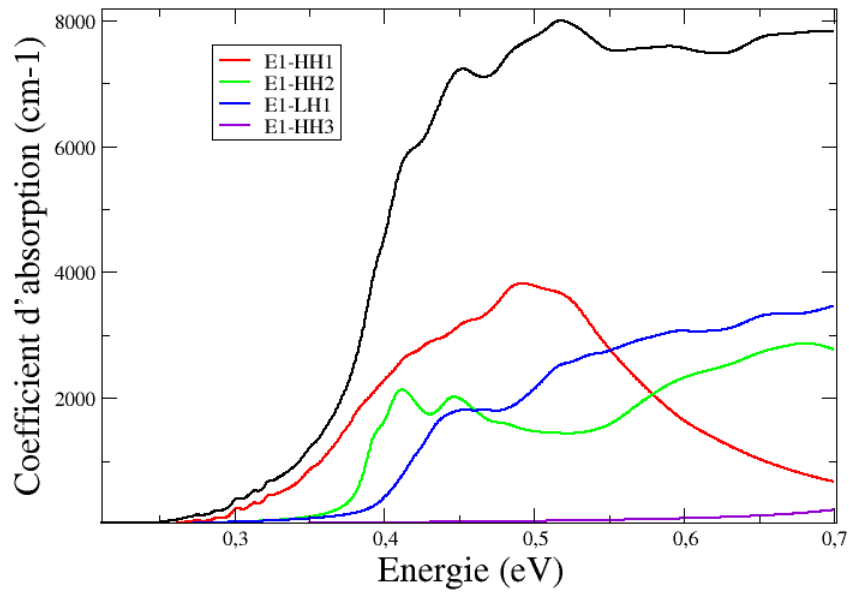


FIGURE 2.36: Coefficient d'absorption à 80K d'un échantillon symétrique (10 MC d'InAs / 10 MC de GaSb) calculé pour une polarisation [0, 0, 1]. Sont aussi représentées les contributions des différentes transitions entre la première bande de conduction et les différentes bandes de valence.

Pour le SR GaSb-rich, on voit sur la figure 2.37 que le confinement est tellement fort pour les trous que même la bande de valence de trous légers a une dispersion en  $\vec{k}$  relativement faible. La transition E1-LH1 fait alors apparaître un pic autour de 0,4 eV dans le coefficient d'absorption.

A l'opposé, le coefficient d'absorption SR InAs-rich présente une rupture de pente à 0,42 eV (figure 2.38), où apparaît la transition E1-LH1, mais du fait de la faible localisation des trous et donc de la forte dispersion en  $\vec{k}$  des bandes de valence aucun pic n'est visible, comme dans le cas de la polarisation [1,0,0].

En conclusion, pour une polarisation [0,0,1], pour les énergies inférieures ( $E < 0,6\text{eV}$ ), le fait que le coefficient d'absorption du SR GaSb est supérieur à

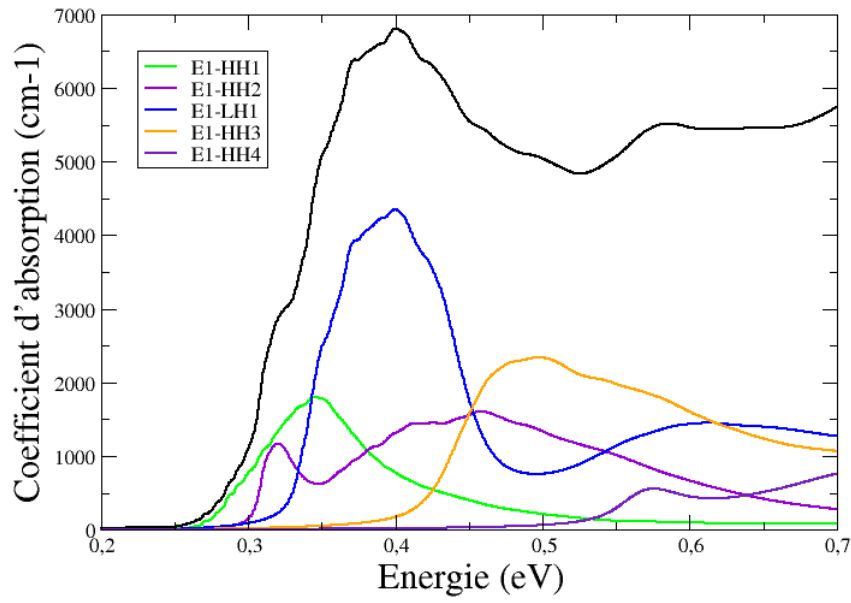


FIGURE 2.37: Coefficient d'absorption à 80K d'un échantillon GaSb-rich (10 MC d'InAs / 19 MC de GaSb) calculé pour une polarisation  $[0, 0, 1]$ . Sont aussi représentées les contributions des différentes transitions entre la première bande de conduction et les différentes bandes de valence.

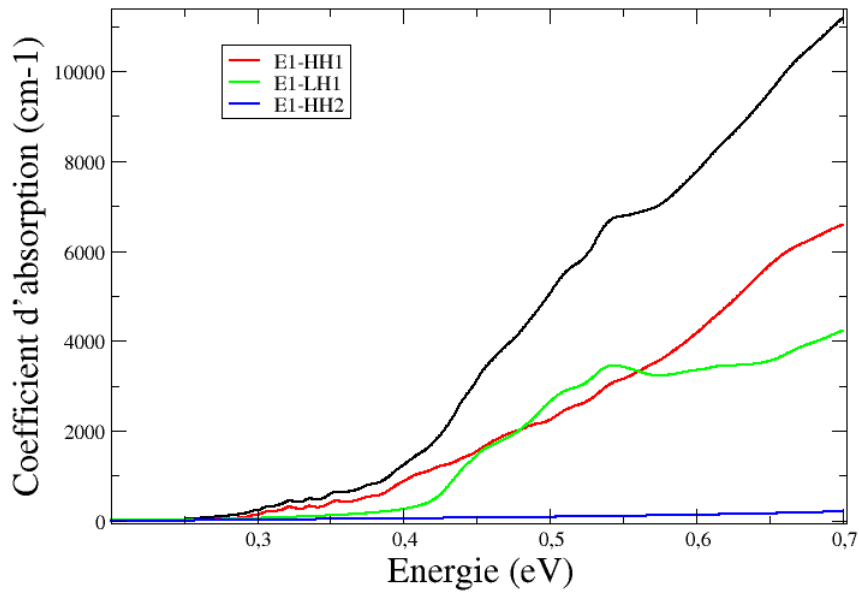


FIGURE 2.38: Coefficient d'absorption à 80K d'un échantillon InAs-rich (7 MC d'InAs / 4 MC de GaSb) calculé pour une polarisation  $[0, 0, 1]$ . Sont aussi représentées les contributions des différentes transitions entre la première bande de conduction et les différentes bandes de valence.

celui du symétrique, qui est lui-même supérieur à celui du SR InAs-rich, est du à deux raisons :

- la contribution de la transition  $E_1-LH_1$  apparaît plus tôt pour un SR GaSb-rich (0,325 eV) que dans un SR symétrique (0,4 eV) ou symétrique (0,42 eV).
- la forte localisation des trous dans le SR GaSb-rich entraîne une faible dispersion des bandes de trous et donc de ce fait la transition  $E_1-LH_1$  contribue rapidement et fortement au coefficient d'absorption, puis diminue ensuite rapidement. A l'opposé, dans un SR InAs-rich, la faible localisation des trous dans le SR entraîne une forte dispersion des bandes de trous et donc de ce fait la transition  $E_1-LH_1$  contribue lentement et de manière progressive au coefficient d'absorption.

Pour les énergies supérieures, le coefficient d'absorption du SR InAs-rich redevient plus élevé, que les coefficients d'absorption des deux autres structures, grâce au meilleur recouvrement des fonctions d'onde d'électron et de trous dans ce SR : c'est ce qu'on observe sur la figure 2.35 pour une énergie de photon incident supérieure à 0,6 eV.

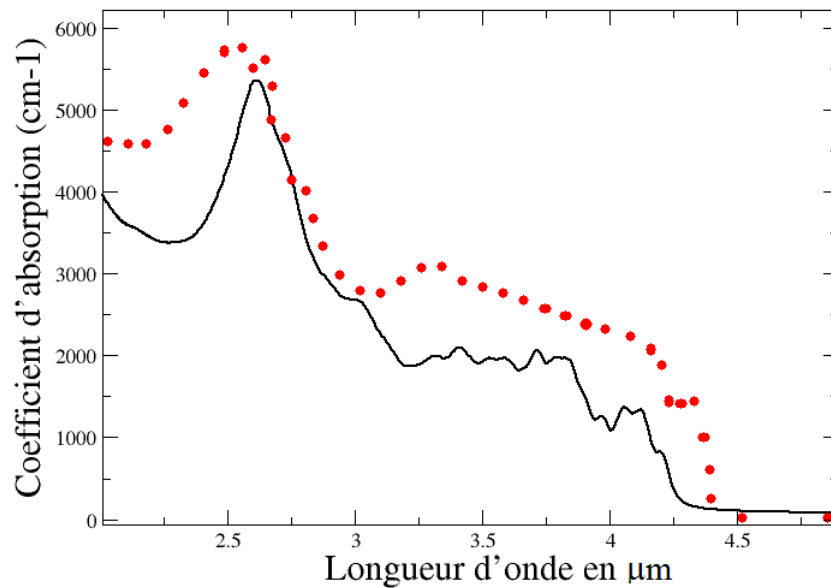


FIGURE 2.39: Coefficient d'absorption à 80K d'un échantillon GaSb-rich (8,6 MC d'InAs / 13,5 MC de GaSb) mesuré par SCD (points rouges) et calculé par mon modèle (trait plein noir) pour une polarisation  $[1, 0, 0]$ .

En 2013, Klipstein *et al* ont présenté une mesure de coefficient d'absorption pour une structure SR GaSb-rich MWIR, qu'ils arrivent à modéliser avec un modèle **kp** 8 bandes avec prise en compte des interfaces [Klipstein *et al.*, 2013] (cf partie 1.3.5). Comme le montre la figure 2.39, mon modèle **kp** 18 bandes arrive aussi à modéliser le coefficient d'absorption d'une mesure réalisée par un autre groupe de

recherche.

De plus, Klipstein *et al* précise que le pic observé à  $2,7\mu\text{m}$  est dû à la transition E1-HH2. Ce résultat est confirmé par mon modèle.

## 2.6 CONCLUSION

Au cours de ce chapitre j'ai, dans un premier temps, présenté les trois structures SR InAs/GaSb qui sont étudiées dans ce mémoire : le SR InAs-rich (7 MC d'InAs / 4 MC de GaSb), le SR symétrique (10 MC d'InAs / 10 MC de GaSb) et le SR GaSb-rich (10 MC d'InAs / 19 MC de GaSb). Ces structures ont des épaisseurs de période différentes, ce qui introduit des différences de comportement :

- une délocalisation des électrons et des trous sur la structure pour le SR InAs-rich, ce qui induit un recouvrement de leurs fonctions d'onde de 77%. Une forte localisation des électrons dans l'InAs et des trous dans le GaSb pour un SR GaSb-rich, ce qui induit un recouvrement de leurs fonctions d'onde de 31%.
- Le SR InAs-rich présente un comportement proche d'un matériau 3D et le SR GaSb-rich un comportement proche d'un matériau 2D.
- Le SR symétrique présente un comportement intermédiaire entre ces deux structures.

J'ai ensuite introduit le code **kp** 18 bandes que j'ai développé pour modéliser la structure de bande et les fonctions d'onde des structures SR. Ce modèle intègre la prise en compte des contraintes, ainsi que la présence d'InSb aux interfaces. L'InSb sert lors de la croissance des échantillons à compenser les contraintes présentes entre l'InAs et le GaSb.

J'ai alors confronté mon modèle à des résultats expérimentaux à partir de deux grandeurs physiques : l'énergie de bande interdite en fonction de l'épaisseur de la période du SR et le spectre d'absorption.

Dans le cas de l'énergie de bande interdite, la valeur théorique est obtenue à partir de la structure de bande calculée à 80K et la valeur expérimentale est extraite des mesures de PL réalisées à 80K à l'IES. Pour obtenir une comparaison valide entre théorie et expérience, j'ai analysé l'influence de la variabilité des paramètres matériaux de l'InAs, de l'InSb et du GaSb sur les énergies de bande interdite calculées. J'ai ainsi pu trouver un ensemble de paramètres issus de la littérature pour obtenir des énergies de bande interdite calculées proches des valeurs mesurées. Les écarts entre expérience et modélisation sont expliqués par l'incertitude d'une MC qui existe sur l'épaisseur de l'InAs et du GaSb dans la période du SR. Les valeurs de paramètres choisies permettent de représenter les énergies de bande interdite de structures SR très différentes (InAs-rich, symétrique et GaSb-rich) et sont maintenant fixés pour toutes mes modélisations. Enfin, j'ai obtenu des résultats similaires entre expérience et modélisation pour l'évolution de l'énergie de bande interdite en fonction de la température, sur un SR GaSb-rich en intégrant l'influence de la température sur le paramètre de maille et l'énergie de bande interdite des matériaux massifs (InAs, GaSb et InSb) donnés dans la littérature. Cependant, mon modèle ne permet pas aujourd'hui de rendre compte de l'évolution en température de l'énergie de bande interdite pour les SR symétrique et InAs-rich et l'étude se poursuit afin de comprendre ces écarts.

De plus, cette comparaison n'étant pas suffisante pour valider mon modèle, je me suis, dans un second temps, intéressé au spectre d'absorption. J'explique alors le modèle que j'utilise pour faire le lien entre les données "microscopiques" calculées par mon code (structure de bande et fonctions d'onde) et le paramètre "macroscopique" et mesurable qu'est le coefficient d'absorption. J'ai dû ensuite développer et réaliser un protocole expérimental qui permette de s'affranchir du substrat pour obtenir cette mesure pour une structure SR.

J'ai alors pu définitivement valider mon modèle en obtenant des résultats expérimentaux et théoriques comparables pour des structures SR sensibles dans le MWIR à 80K. J'ai ainsi montré que l'utilisation d'un modèle **kp** 18 bandes permet de représenter différents types de structures SR InAs/GaSb dans le MWIR à 80K et ceci sans ajout d'élément de prise en compte des interfaces. De plus, mon modèle a montré que l'InAs-rich avait une absorption similaire à celle d'un matériau 3D, le GaSb-rich similaire à un matériau 2D et que l'InAs-rich est la structure SR avec le plus fort niveau d'absorption des trois structures étudiées. Plus généralement, j'ai pu calculer les coefficients d'absorption des trois structures étudiées à 80K pour une polarisation  $[1,0,0]$  et  $[0,0,1]$  et j'ai pu expliquer la forme des résultats obtenus. Enfin, j'ai réussi à modéliser, avec mon code **kp** 18 bandes, le coefficient d'absorption d'un SR GaSb-rich réalisé par le groupe SCD et ainsi retrouvé le résultat de modélisation d'un modèle **kp** 8 bandes avec prises en compte des interfaces.

Maintenant que mon modèle a été validé pour la représentation des SR InAs/GaSb dans le MWIR, je vais pouvoir l'utiliser pour calculer et analyser les propriétés intrinsèques des SR InAs/GaSb et l'étendre à l'étude de structures SR pour des détecteurs opérant dans le LWIR.





## MODÉLISATION DES PROPRIÉTÉS INTRINSÈQUES DU SUPERRÉSEAU INAS/GASB POUR LA DÉTECTION IR

---

La comparaison de notre code à des résultats expérimentaux a permis d'établir sa capacité à modéliser les propriétés optiques (énergie de bande interdite et coefficient d'absorption) des SR InAs/GaSb pour le MWIR à 80K. Je vais donc pouvoir utiliser les sorties de mon modèle pour calculer différentes structures SR. Aussi, le propos de ce chapitre sera de donner des éléments d'analyse du fonctionnement des détecteurs SR InAs/GaSb à jonction pin par l'intermédiaire de différentes propriétés intrinsèques de la zone d'absorption, comme la concentration intrinsèque de porteurs libres et la masse effective.

Pour chaque grandeur physique étudiée, je commencerai par présenter les modèles utilisés et parlerai, le cas échéant, de leur domaine de validité. Enfin, je ferai une analyse des résultats obtenus pour les trois structures SR étudiées dans ce manuscrit et présenterai des abaques de résultats plus généraux pour un ensemble de structures SR différentes.

Ces paramètres calculés me permettront de mieux comprendre le fonctionnement du SR InAs/GaSb dans une structure photodiode pin. En effet, une photodiode génère un courant photonique par l'absorption de photons. Le courant photonique se crée donc en deux étapes. Premièrement, l'absorption d'un photon crée une paire électron trou. Dans ce cas, j'ai montré théoriquement que le SR InAs-rich a un plus haut niveau d'absorption que les autres structure SR étudiées. Dans un second temps, il faut collecter les porteurs créés. La masse effective, qui sera calculée pour les porteurs, nous donnera des informations sur le transport des porteurs photo-générés. Enfin, le fonctionnement d'une photodiode pin se fait en présence d'un champ électrique résiduel ou appliqué. C'est pourquoi je m'intéresserai à la mise sous tension de la zone d'absorption dans mon modèle.

Je proposerai, dans une dernière partie, de nouvelles structures SR InAs/GaSb adaptées à la détection dans le LWIR qui devraient permettre de réduire le courant tunnel.

### 3.1 MODÉLISATION DE LA CONCENTRATION INTRINSÈQUE DES PORTEURS LIBRES

La concentration intrinsèque de porteurs libres ( $n_i$ ) est une grandeur physique qui nous renseignera partiellement sur le niveau de courant d'obscurité lié à la diffusion ou à la génération-recombinaison dans les détecteurs.

Pour modéliser la concentration intrinsèque de porteurs libres, il faut dans un premier temps calculer la densité d'états (DE).

### 3.1.1 Calcul de la densité d'états

Dans la partie 2.1.2, j'ai présenté les formules de densité d'états pour un matériau 2D ou 3D. Notamment, l'équation 2.3 donne une valeur approximée de la densité d'états dans un SR.

Dans notre cas, il n'y a pas besoin de faire d'approximation pour calculer la densité d'états. En effet, la densité d'états est directement obtenue à partir de la structure de bande calculée par notre méthode **kp**. Pour une énergie donnée  $E$ , on recherche dans l'espace des  $\vec{k}$  dans la zone de Brillouin, les énergies  $E_k$  de la structure de bande égales à  $E$ . On obtient la densité d'état en faisant ainsi la somme de tous les états disponibles de la structure de bande :

$$\rho(E) = \sum_{\vec{k}} \delta(E - E_k) \quad (3.1)$$

Cette méthode est schématisée sur la figure 3.1.

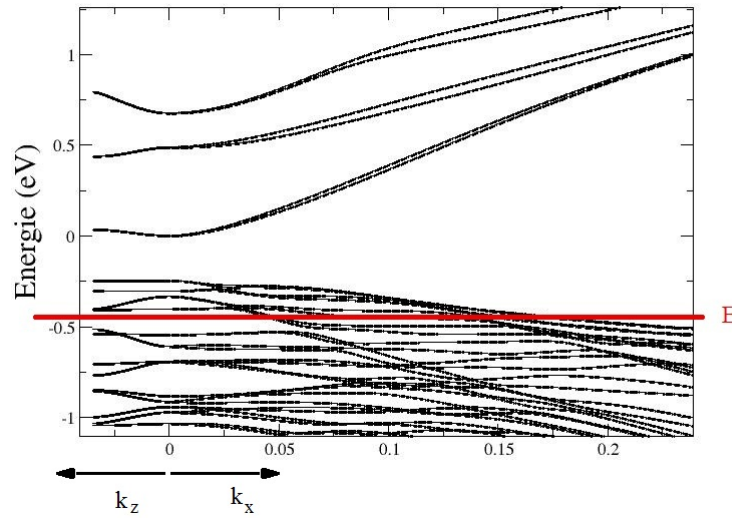


FIGURE 3.1: Structure de bande d'un SR GaSb-rich (10 MC d'InAs / 19 MC de GaSb) représentant le calcul de la densité d'états à partir d'une structure de bande calculée. Pour une énergie  $E$  donnée, on somme la contribution de toutes les énergies de la structure de bande égale à  $E$ .

### 3.1.2 Densité d'état des structures étudiées

Les figures 3.2 et 3.3 présentent la densité d'états calculée pour nos trois structures types pour les électrons et les trous en fonction de l'énergie. La DE est une figure assez proche du coefficient d'absorption mais qui ne dépend pas des fonctions d'onde. Le coefficient d'absorption peut d'ailleurs être exprimé en fonction de la densité d'états joints :

$$\alpha(\omega) = \frac{2q^2\pi|\vec{r}_{vc}|^2\omega}{3n_{op}c\epsilon_0\hbar} D_{cv}(\omega) [f_v(\hbar\omega) - f_c(\hbar\omega)] \quad (3.2)$$

Avec  $\omega$  la pulsation,  $q$  la charge élémentaire,  $|\vec{r}_{vc}|$  l'élément de matrice dipolaire de la transition bande de valence vers la bande de conduction,  $n_{op}$  l'indice optique de la structure,  $\epsilon_0$  la permittivité du vide,  $c$  la vitesse de la lumière dans le vide,  $\hbar$  la constante de Planck réduite,  $f_c$  et  $f_v$  les fonctions de Fermi-Dirac qui décrivent la probabilité d'occupation des niveaux  $E_c$  et  $E_v$  respectivement et  $D_{cv}(\omega)$  la densité d'états joints.

On s'attend donc à trouver des résultats similaires à ceux observés lors du chapitre 2 sur la modélisation de l'absorption, notamment sur le comportement 2D ou 3D des structures SR.

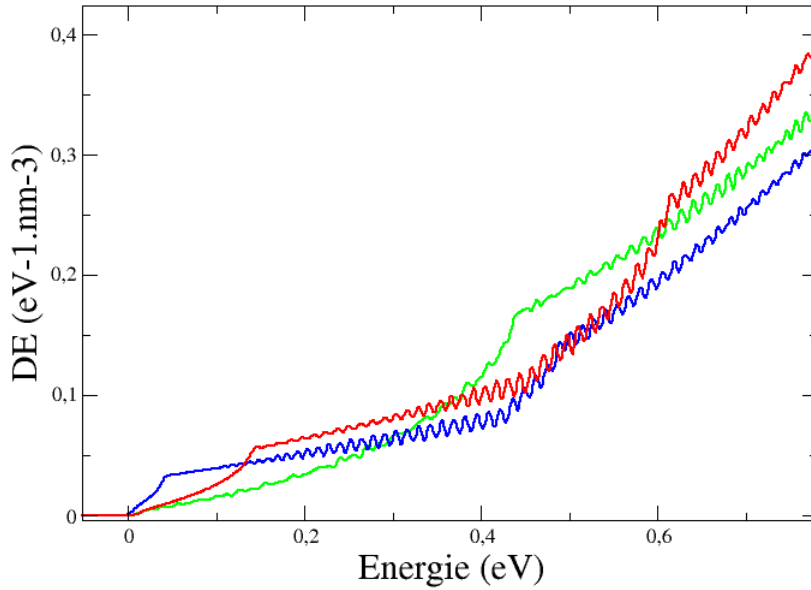


FIGURE 3.2: Densité d'états théorique en fonction de l'énergie pour les bandes de conduction à 77K pour les trois structures SR étudiées : SR InAs-rich (7 MC d'InAs / 4 MC de GaSb) en rouge, SR symétrique (10 MC d'InAs / 10 MC de GaSb) en vert et SR GaSb-rich (10 MC d'InAs / 19 MC de GaSb) en bleue.

Cette différence de comportement 2D / 3D est surtout marquée sur la densité d'états de trous. En effet, sur la figure 3.3, on peut observer pour le SR InAs-rich une densité d'états de trous en forme de  $\sqrt{E}$ , qui est la forme attendue pour une

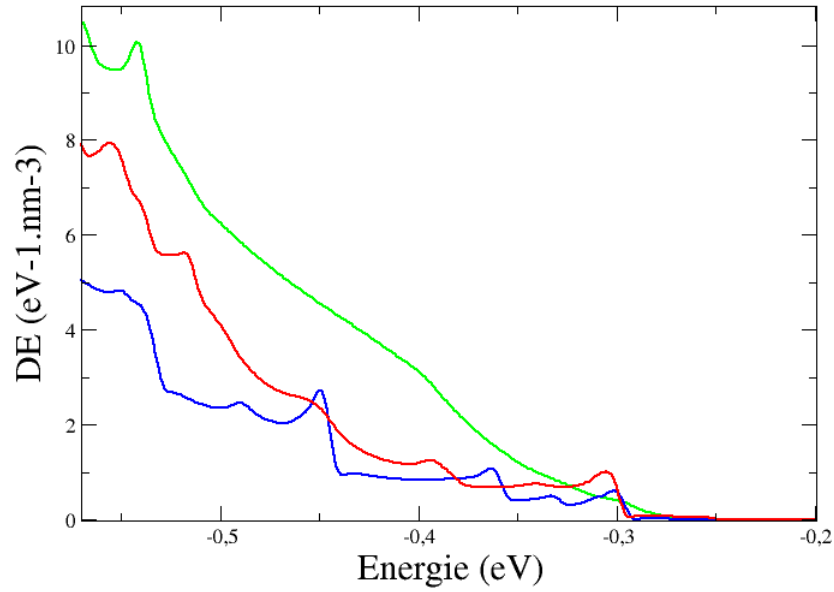


FIGURE 3.3: Densité d'états théorique en fonction de l'énergie pour les bandes de valence à 77K pour les trois structures SR étudiées : SR InAs-rich (7 MC d'InAs / 4 MC de GaSb) en rouge, SR symétrique (10 MC d'InAs / 10 MC de GaSb) en vert et SR GaSb-rich (10 MC d'InAs / 19 MC de GaSb) en bleue.

densité d'état d'une structure 3D d'après l'équation 2.1. Au contraire, pour la densité d'états de trous du SR GaSb-rich, on retrouve une DE en forme de marche (fonction heaviside), ce qui est représentatif d'une structure 2D comme le montre l'équation 2.2. Enfin, le SR symétrique présente un comportement intermédiaire entre une structure 2D et une structure 3D.

Dans le cas des densités d'états d'électron, les différences de comportement sont moins visibles, notamment dans le cas du SR GaSb-rich où les marches d'une densité 2D sont moins discernables. Ceci vient du fait que les électrons sont délocalisés sur l'ensemble du SR, comme le montre leur probabilité de présence (figure 2.2 à 2.3).

### 3.1.3 Concentration intrinsèque de porteurs libres

Les électrons et les trous d'un semiconducteur respectent la statistique de Fermi. De ce fait, la probabilité à une température  $T$  qu'un niveau d'énergie soit occupé par un porteur est donnée par la fonction de distribution de Fermi-Dirac  $f(E)$  :

$$f_c(E) = \frac{1}{1 + e^{(E-E_F)/k_b T}} \quad (3.3)$$

Où  $E_F$  est le niveau de Fermi. La densité d'électrons est alors donnée par la formule suivante :

$$n = \int_{E_c}^{+\infty} \rho_c(E) f_c(E) dE \quad (3.4)$$

Avec  $\rho_c(E)$  la densité d'états des bandes de conduction de la structure. L'intégrale est effectuée entre  $E_c$  et  $+\infty$  car en dessous de l'énergie de bande interdite il n'y a plus d'état disponible pour les électrons.

De la même manière, la densité de trous s'exprime sous la forme :

$$p = \int_{-\infty}^{E_v} \rho_v(E) f_v(E) dE \quad (3.5)$$

Avec  $E_v$  l'énergie du haut de la première bande de valence,  $\rho_v(E)$  la densité d'états des bandes de valence de la structure et  $f_v(E)$  la fonction de distribution de Fermi-Dirac pour les trous :

$$f_v(E) = \frac{1}{1 + e^{(E_F - E)/k_b T}} \quad (3.6)$$

Dans le cas d'un semiconducteur non dopé, la densité d'électrons ou de trous ne dépend pas du niveau de Fermi, on parle alors de concentration intrinsèque de porteurs  $n_i = \sqrt{np}$ . Cette valeur ne dépend que de la température.

Mon modèle a été validé à 80K, cependant, la modélisation de l'évolution des énergies de bande interdite en fonction de la température est encore en cours d'investigation pour retrouver la dépendance à la température des énergies de bande interdite des SR InAs-rich et symétrique. Il serait donc peu pertinent de modéliser actuellement l'évolution en fonction de la température des  $n_i$  des trois structures types étudiées dans ce mémoire.

La température de fonctionnement des détecteurs SR habituelle étant de 80K, il est tout de même intéressant de calculer un abaque de la concentration intrinsèque de porteurs libres de différentes structures SR.

L'abaque 3.4 montre que plus l'épaisseur d'InAs est importante dans la période, plus la concentration intrinsèque de porteurs libres est importante et ceci quasiment quelle que soit l'épaisseur de GaSb. La zone blanche sur la droite du graphe correspond au moment où le SR n'a plus un comportement de semiconducteur mais un comportement semi-métallique. L'abaque de la figure 3.4 est une sortie du code très utile car il permet d'estimer les valeurs de  $n_i$  pour n'importe quelle période du SR InAs/GaSb, pour le domaine spectral du MWIR et du LWIR.

### 3.2 MODÉLISATION DE LA MASSE EFFECTIVE

Dans le premier chapitre, j'ai introduit l'intérêt des fortes masses effectives des SR pour limiter les courants tunnels qui sont une source de bruit. Cependant, de trop fortes masses effectives peuvent être limitantes pour la collecte des porteurs. Il est donc nécessaire de trouver une structure SR ayant un bon compromis entre réduction du courant tunnel et efficacité de la collecte des porteurs photo-générés.

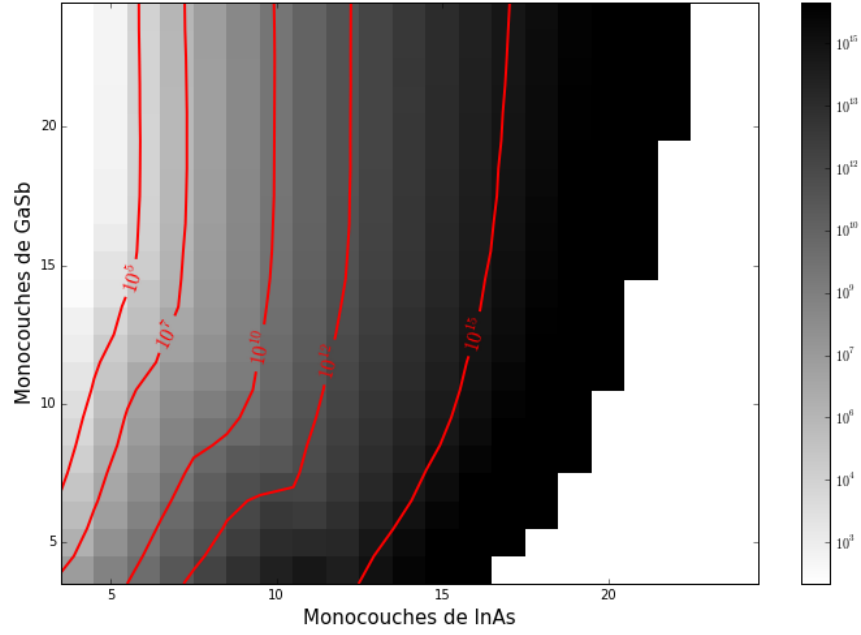


FIGURE 3.4: Concentration intrinsèque de porteurs libres à 80K en fonction du nombre de MC d'InAs sur l'axe des abscisses et de GaSb sur l'axe des ordonnées.

### 3.2.1 Calcul de la masse effective

La masse effective est définie par :

$$m_{x,y,z}^* = \hbar^2 \left( \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_{x,y,z}^2} \right)^{-1}_{\vec{k}=\vec{0}} \quad (3.7)$$

La masse effective est positive pour une bande de conduction et négative pour une bande de valence. Il est donc facile de remonter à la valeur de la masse effective à l'aide de la structure de bande calculée. Il suffit de calculer la dérivée seconde de l'énergie au centre de la zone de Brillouin.

Cependant, à partir d'une trop grande épaisseur de période, le SR se rapproche d'un fonctionnement multipuits quantique. Les porteurs sont alors sur des états liés. Ils ne sont donc plus bien représentés par cette masse effective, qui devient donc une grandeur physique non pertinente.

### 3.2.2 Masse effective des électrons dans les superréseaux

La figure 3.5 est un abaque des masses effectives des électrons calculées dans la direction de croissance en fonction de l'énergie de bande interdite de la structure SR. Le long d'une ligne rouge, les structures ont la même épaisseur d'InAs dans la période et c'est l'épaisseur de GaSb qui varie. A l'inverse, le long d'une ligne noire, c'est l'épaisseur de GaSb dans la période qui est constante et c'est l'épaisseur d'InAs qui varie.

Premièrement, on aurait pu s'attendre à ce que la masse effective du SR soit une interpolation linéaire des masses effectives des deux matériaux de la période, de la forme  $m_{SR}^* = d_{InAs} * m_{InAs}^* + d_{GaSb} * m_{GaSb}^*$ . Où  $d_{InAs}$  est l'épaisseur dans la période d'InAs divisée par l'épaisseur totale de la période et  $d_{GaSb}$  l'épaisseur de GaSb dans la période divisée par l'épaisseur totale de la période. A titre de rappel, l'InAs a une masse effective d'électron de  $0,023m_0$  et le GaSb  $0,041m_0$ . Or, notre calcul donne toujours une valeur supérieure à cette interpolation. Ce résultat surprenant vient du fait que l'on calcule la masse effective dans la direction de croissance et que dans cette direction, il existe une périodicité due à la structuration SR qui se superpose au maillage cristallin des matériaux. La structure de bande dans cette direction est donc fortement dépendante de cette structuration et beaucoup moins du maillage atomique des matériaux constituant la période. Or, le calcul de la structure de bande montre que la structuration SR tend à "aplatir" les bandes, donnant ces masses effectives élevées.

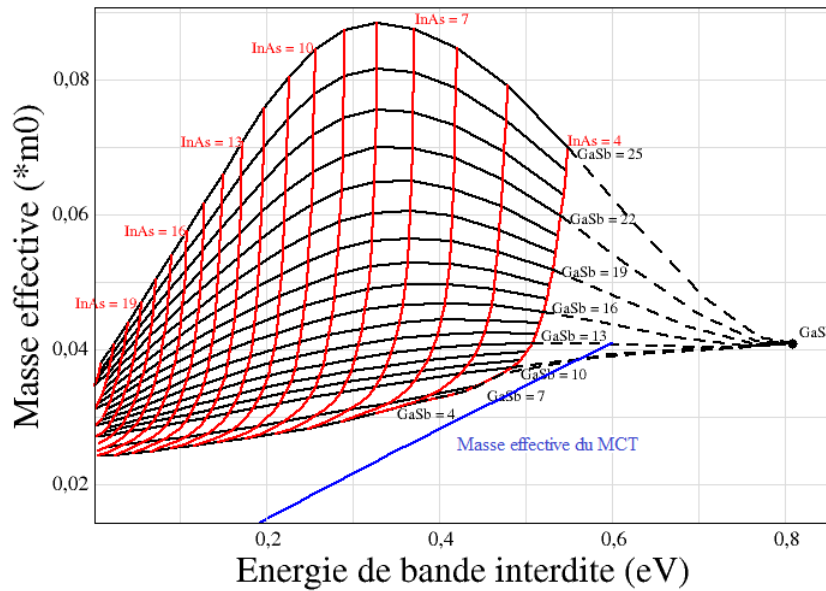


FIGURE 3.5: Masse effective des électrons calculée dans la direction de croissance en fonction de l'énergie de bande interdite du SR à 80K, avec les limites vers lesquels tendent les courbes. La droite en bleue présente la masse effective des électrons dans le MCT en fonction de l'énergie de bande interdite [Hansen et Schmit, 1983].

De plus, on peut noter une tendance sur la figure 3.5. Le long d'une ligne noire, lorsque l'épaisseur d'InAs dans la période diminue et tend vers 0, la masse effective du SR tend alors progressivement vers la masse effective du matériau GaSb massif. Inversement, lorsque l'épaisseur de GaSb diminue dans la période, l'énergie de bande interdite tend progressivement vers 0, au-delà le SR a un comportement semi-métallique. Ce comportement est bien prévu par la théorie [Sai-Halasz et al., 1978] et a été observé expérimentalement [Chang et al., 1979]. Ces premières observations tendent à confirmer la validité physique des résultats de notre modèle.



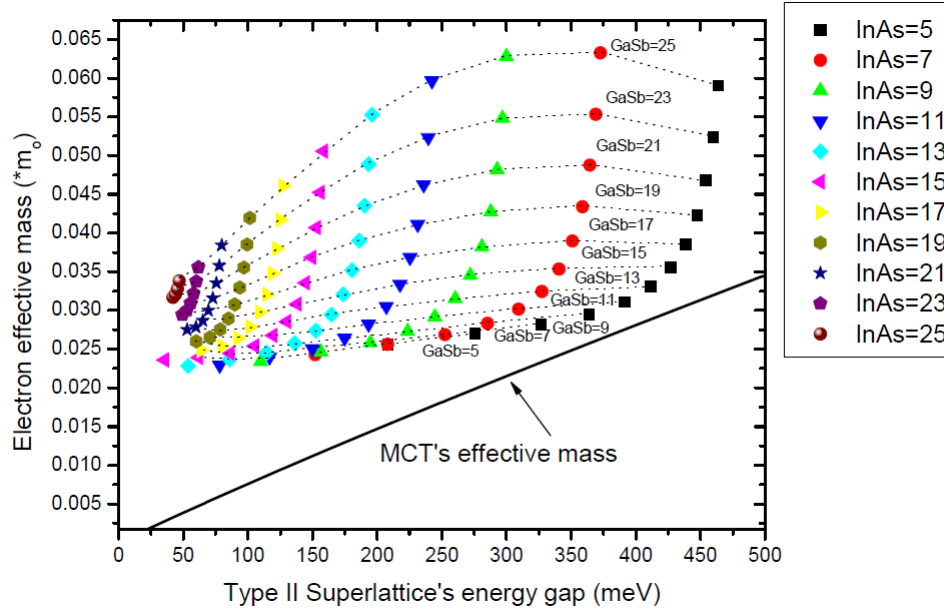


FIGURE 3.6: Masse effective des électrons calculée dans la direction de croissance en fonction de l'énergie de bande interdite du SR à 80K, figure issue de [Nguyen, 2010].

Sur la figure 3.6, je rappelle l'abaque des masses effectives en fonction de l'énergie de bande interdite obtenu au CQD par une approche Tight-Binding (cf chapitre 1.3.2) [Nguyen, 2010].

On peut voir que les valeurs pour les masses effectives calculées selon une approche Tight-Binding et mon modèle  $\mathbf{kp}$  18 bandes sont comparables, notamment pour les valeurs de SR avec de faibles épaisseurs de GaSb. On retrouve en particulier sur les deux abaques que la valeur de la masse effective dépend majoritairement de l'épaisseur de GaSb dans la période.

La figure 3.5 montre aussi que, pour une longueur d'onde donnée, toutes les masses effectives sont accessibles de  $0,025 \cdot m_0$  à  $0,05 \cdot m_0$  pour une énergie de bande interdite de l'ordre de  $0,125$  eV, soit une longueur d'onde de coupure de  $10 \mu\text{m}$ , en jouant principalement sur la quantité de GaSb dans la période. Or, comme je l'ai introduit dans le premier chapitre, une masse effective élevée joue un rôle important pour limiter les courants tunnels et plus l'énergie interdite est petite, plus ces courants de fuite sont importants.

En conclusion, la masse effective des électrons des détecteurs SR sera toujours supérieure à celle de l'InAs ou à tous matériaux massifs à énergie de bande interdite équivalente dans le MWIR et le LWIR, comme par exemple l'InSb qui a une masse effective des électrons de  $0,014 m_0$ . Sur la figure 3.5, j'ai ajouté à titre de comparaison la valeur de la masse effective des électrons dans le MCT en fonction de l'énergie de bande interdite. On peut alors voir que la masse effective des électrons du SR est toujours supérieure à celle du MCT dans le MWIR et le LWIR. Ce point particulier confirme l'avantage du matériau SR InAs/GaSb devant les matériaux massifs pour

la limitation des courants tunnels.

Sur la figure 3.7, je présente cette fois les masses effectives des électrons dans la direction perpendiculaire à la direction de croissance. On observe que les masses effectives dans cette direction sont plus faibles.

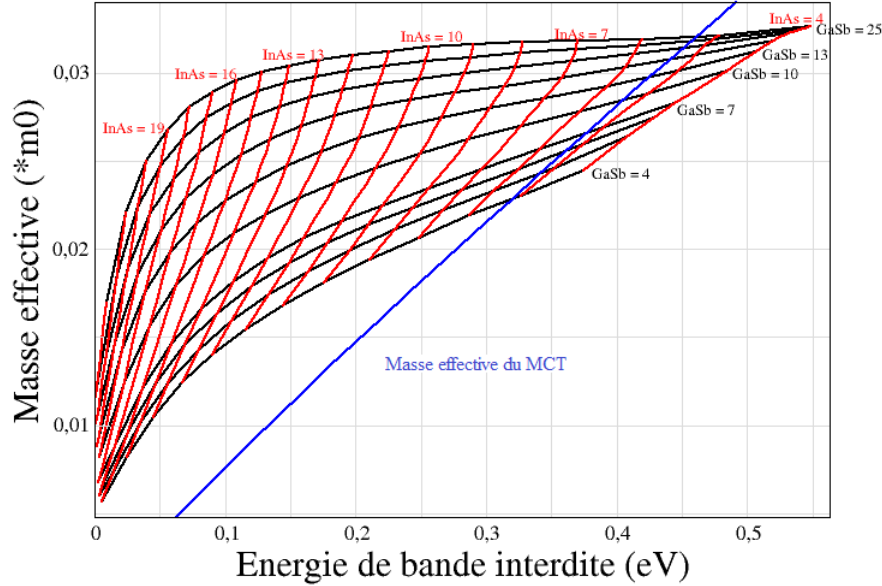


FIGURE 3.7: Masse effective des électrons calculée dans la direction perpendiculaire à la direction de croissance en fonction de l'énergie de bande interdite du SR.

Dans cette direction, les électrons voient les matériaux de la période et non la structuration SR, il est donc logique que leur masse effective soit du même ordre de grandeur que celle des matériaux. On peut également noter que la masse effective des électrons dans le plan des couches tend vers la masse effective des électrons dans le GaSb lorsque l'épaisseur d'InAs dans la période diminue et que celle de GaSb reste constante. De plus, on observe que lorsque l'énergie de bande interdite diminue, les masses effectives diminuent fortement, jusqu'à  $0,075m_0$ . Ceci correspond au comportement observé empiriquement pour les matériaux semiconducteurs massifs [Kane, 1957], cependant les masses effectives des électrons dans le SR restent supérieures à celle du MCT pour les énergies de bande interdite dans le MWIR et le LWIR, comme on peut le voir sur la figure 3.7.

Enfin, le tableau 3.1 résume les valeurs de la masse effective des électrons des trois structures étudiées et des matériaux massifs InAs et GaSb.

Dans le tableau 3.2, j'ai comparé des mesures de masse effective issue de la littérature [Suchalkin *et al.*, 2011; Haugan *et al.*, 2010] avec mes résultats de modélisation. Certains des SR, sur lesquels ont été réalisés ces mesures, n'ont pas de compensation de contrainte aux interfaces (CCI). Dans ce cas, je modélise cette structure SR sans

TABLE 3.1: Masse effective des trois structures étudiées à 80K.

	$m_{\perp}(*m_0)$	$m_{//}(*m_0)$
InAs	0,023	0,023
SR InAs-rich	0,028	0,021
SR symétrique	0,032	0,024
SR GaSb-rich	0,0525	0,029
GaSb	0,041	0,041

TABLE 3.2: Masse effective des électrons mesurée (donnée de la littérature) et calculée par mon modèle.

CCI	Épaisseur InAs (Å)	Épaisseur GaSb (Å)	$m_{//}^*(*m_0)$ expérimentale	$m_{\perp}^*(*m_0)$ expérimentale	$m_{//}^*(*m_0)$ calculé	$m_{\perp}^*(*m_0)$ calculé
Sans	10	10	0,025	0,034	0,0268	0,0326
Avec	-	-	-	-	0,0242	0,0332
Sans	15	15	0,028	0,031	0,0271	0,0314
Avec	-	-	-	-	0,0251	0,0321
Sans	42	21	0,023	0,03	0,0236	0,0261
Avec	-	-	-	-	0,0177	0,0274
Avec	46,5	19,5	-	0,068	0,0257	0,0215

InSb aux interfaces pour prendre en compte l'absence de CCI.

On peut voir que mon modèle calcule des valeurs assez proches des mesures pour les trois premiers SR. Ces mesures sont issues de [Suchalkin *et al.*, 2011]. En revanche, la valeur mesurée par Haugan *et al.*, qui a été réalisée sur un SR InAs-rich avec CCI (46,5 MC d'InAs / 19,5 MC de GaSb), est largement au-dessus des valeurs modélisées, mais aussi de la mesure de Suchalkin *et al* pour un SR InAs-rich (42 MC d'InAs / 21 MC de GaSb). Or, d'après mes calculs l'ajout d'InSb pour compenser les contraintes introduit un écart maximum de 5% sur l'évaluation de la masse effective. La valeur mesurée de  $0,07m_0$  par Haugan paraît donc ne pas être représentative. Il serait donc intéressant de réaliser des mesures de masse effective sur les SR compensés de l'IES afin de vérifier leur adéquation avec mes résultats de modélisation avec compensation de contraintes à l'interface.

### 3.2.3 Masse effective des trous dans les superréseaux

Comme je l'ai expliqué précédemment, le calcul pour les masses effectives de trous lourds donne des valeurs de masse effective très élevées dans le cas de structure avec une épaisseur d'InAs dans la période importante, car alors, les trous sont confinés dans le GaSb. C'est pourquoi je ne présenterai que les masses effectives de trous lourds calculées dans la direction de croissance pour des structures dont l'épaisseur d'InAs est inférieure à 10 MC dans la période. On peut observer que pour ces épaisseurs d'InAs, les masses de trous lourds atteignent rapidement des

valeurs qui sont égales à plusieurs fois la masse de l'électron libre. Ces valeurs de masse effective de trous tendent même vers l'infini, car ils ne peuvent plus à partir d'une certaine épaisseur d'InAs se déplacer. Ils sont dans un état lié du matériau GaSb.

Enfin, la courbe semble se "déformer" quand l'épaisseur d'InAs dépasse 6 MC dans la période, contrairement à la courbe des masses effectives des électrons qui est très régulière. Ceci peut venir du fait que j'évalue une dérivée seconde qui devient très faible, ceci entraînant du bruit numérique.

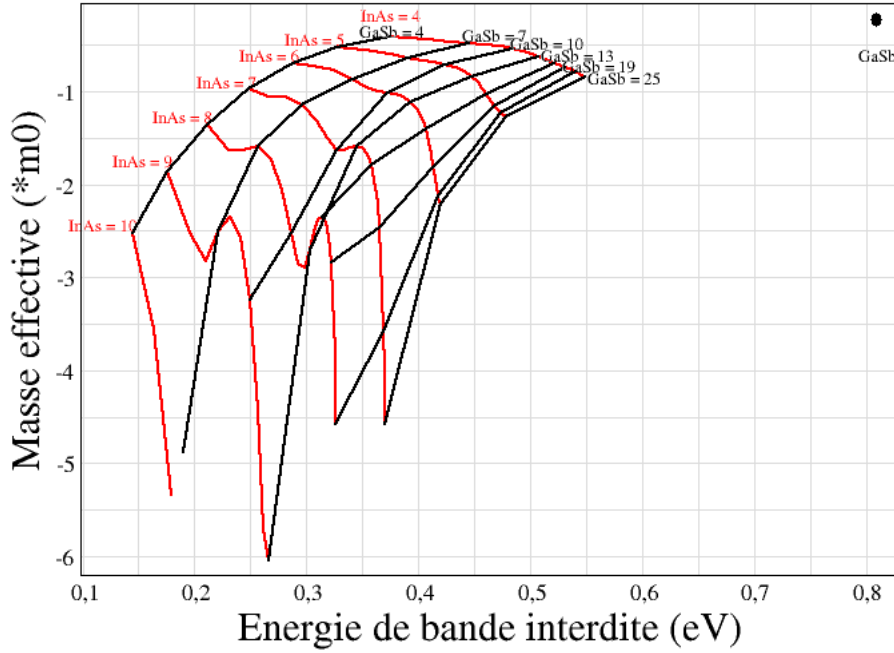


FIGURE 3.8: Masse effective des trous lourds calculée dans la direction de croissance en fonction de l'énergie de bande interdite du SR à 80K.

Dans le cas du SR InAs-rich (7 MC d'InAs / 4 MC de GaSb), la moindre localisation des trous sur l'ensemble de la structure permet de calculer une masse effective avec notre modèle. On trouve une valeur de  $-1,0m_0$  pour les trous lourds. Cette valeur de masse effective est très élevée. A titre de comparaison, les trous lourds du MCT ont une masse effective de  $-0,55m_0$ .

### 3.2.3.1 Limitation du SR InAs-rich pour la détection

Les structures SR InAs-rich sont celles qui présentent le plus fort recouvrement des fonctions d'ondes. Cela engendre une forte absorption, comme rapporté sur la figure 2.31. Par contre, il a été observé expérimentalement au sein de notre équipe [Giard, 2015] que le rendement quantique des structures SR InAs-rich est plus faible que celui des SR symétriques et GaSb-rich (figure 3.9). Il a été mis en évidence que ceci viendrait d'un problème dans la collecte des porteurs [Giard et al., 2014b]. Pour comprendre ce problème, il faut revenir au fonctionnement d'une photodiode pin,

pour voir comment une trop forte masse effective de porteur peut limiter la collecte.

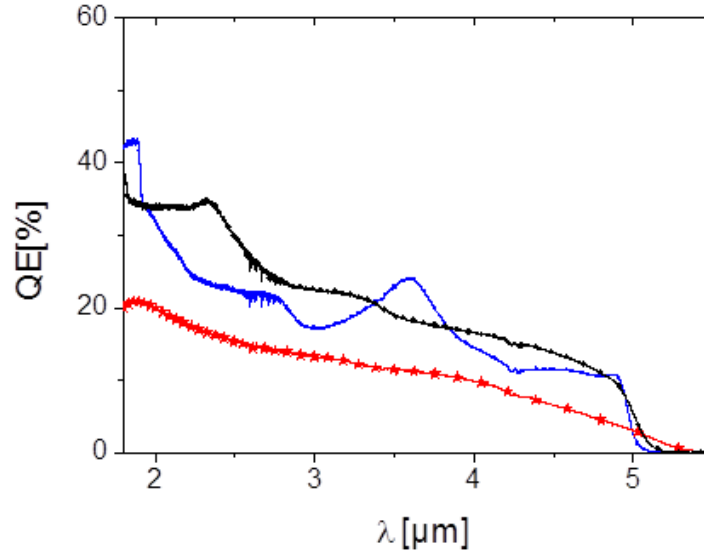


FIGURE 3.9: Rendement quantique en fonction de la longueur d'onde à 77K pour les trois structures étudiées avec une zone d'absorption de 1  $\mu\text{m}$  : InAs-rich (rouge), symétrique (noir) et GaSb-rich (bleu). Figure issue de [Giard, 2015]

Dans le cas général d'une photodiode pin réelle, il est possible que la zone de charge d'espace (ZCE) ne couvre pas la totalité de la zone intrinsèque où sont créées les paires électrons-trous, car la zone intrinsèque a un dopage résiduel (figure 3.10 et 3.11). Or, les porteurs ont une certaine longueur de diffusion qui est la distance qu'ils peuvent parcourir sans champ électrique appliqué avant de se recombiner. Si la longueur de diffusion des porteurs est inférieure à la taille de la ZCE, certains vont pouvoir se recombiner avant d'être collectés comme le montre la figure 3.11.

La longueur de diffusion peut être exprimée de la manière suivante :

$$L = \sqrt{\mu \frac{k_B T}{q}} \cdot \tau \quad \text{et} \quad \mu = \frac{q\tau}{m^*} \quad (3.8)$$

Où  $T$  est la température de fonctionnement,  $\mu$  la mobilité du porteur et  $\tau$  sa durée de vie. Notre équipe a de plus montré que le temps de vie des porteurs minoritaires (électrons ou trous) dans les SR est du même ordre de grandeur, à savoir entre 20 et 30 ns [Giard, 2015]. Le seul élément différent pour les longueurs de diffusion entre un SR résiduel  $n$  ou  $p$  est donc la mobilité  $\mu$ . Or, la mobilité est inversement proportionnelle à la masse effective du porteur. Et les porteurs résiduels du SR InAs-rich sont des trous, car cette structure SR, non intentionnellement dopée, est de type  $n$  [Delmas *et al.*, 2014]. Ce sont donc ces derniers qui vont diffuser vers la zone de charge d'espace après création d'une paire électron-trou.

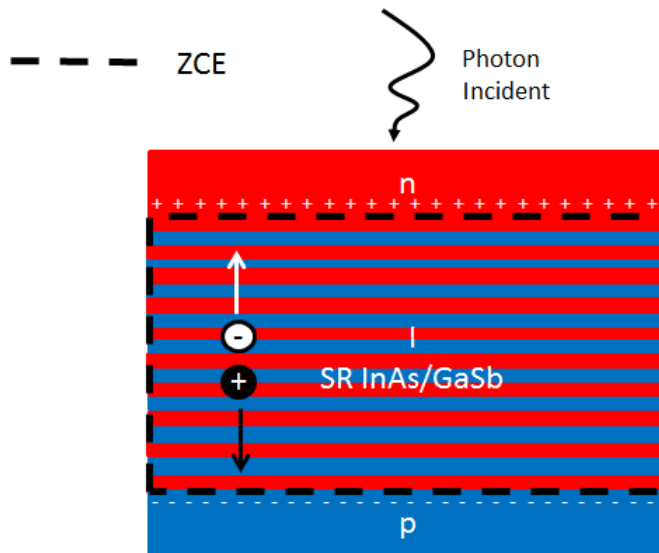


FIGURE 3.10: Schéma de fonctionnement d'une photodiode pin idéale lors de la collecte des porteurs.

Les trous du SR InAs-rich vont donc avoir une longueur de diffusion très faible du fait de leur masse effective élevée. Ceci va fortement diminuer la collecte des porteurs et donc le rendement quantique du détecteur à base de SR InAs-rich.

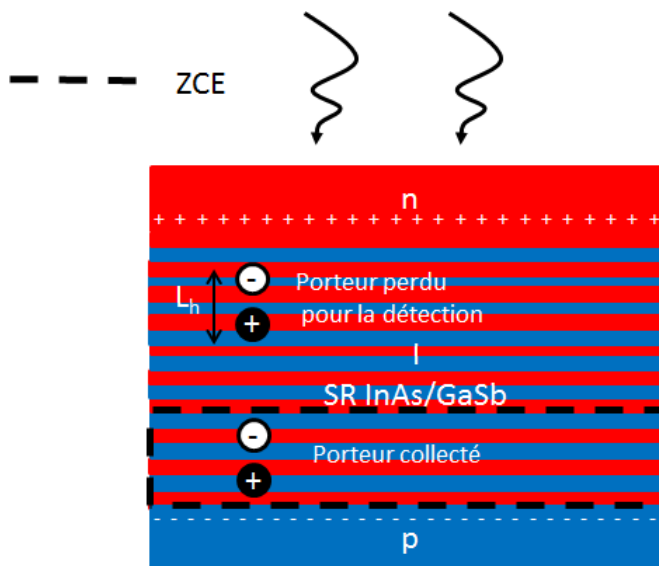


FIGURE 3.11: Schéma de fonctionnement d'une photodiode  $pn^-n$  réelle lors de la collecte des porteurs.

A l'inverse, dans les structures GaSb-rich et symétrique, les porteurs minoritaires sont des électrons car le dopage résiduel est de type p. Or, la masse effective des électrons est bien plus faible que celle des trous de l'InAs-rich, ce qui leur permet d'avoir une mobilité et donc une longueur de diffusion plus élevée et explique leurs

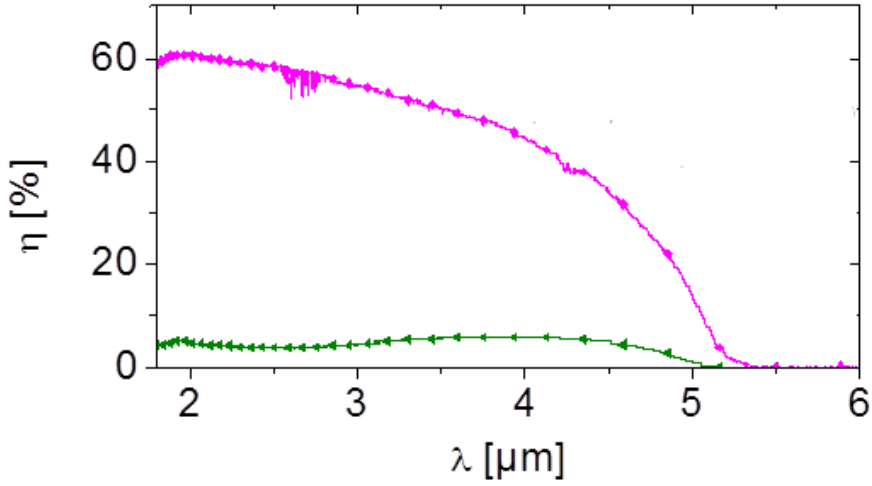


FIGURE 3.12: Rendement quantique fonction de la longueur d'onde pour une structure InAs-rich non dopé (vert) et dopé p (violet) à 77K avec une zone d'absorption de  $4\mu\text{m}$ .

meilleurs rendements quantiques.

Pour contrer cet effet, il a été proposé de doper p le SR InAs-rich de manière à ce que les porteurs minoritaires soient des électrons. Ces structures SR InAs-rich dopées p ont alors effectivement donné de bien meilleur rendement quantique comme le montre la figure 3.12 [Giard *et al.*, 2014a].

Une autre possibilité serait de réaliser la collecte des porteurs non plus verticalement mais horizontalement. Un tel procédé a déjà été utilisé pour des détecteurs MCT [Kinch, 2014] et un brevet a déjà été déposé pour l'utiliser avec des SR [Hirayama *et al.*, 1997]. En effet, dans la direction perpendiculaire à la direction de croissance, les trous ne sont plus bloqués par la structuration SR et ont même des masses effectives inférieures à celle des matériaux InAs et GaSb massifs pour certaines structures SR (figure 3.13) et à celle du MCT ( $-0,55m_0$ ). Ce procédé se nomme le "loop-hole".

Dans la direction horizontale, les masses effectives faibles des trous lourds suppriment le problème de la collecte dans le cas où les trous sont les porteurs minoritaires. De plus, la technologie mise en place pour réaliser ces photodiodes "loop-hole" pourrait aussi résoudre le problème de la passivation pour supprimer les courants de fuites latéraux dans les détecteurs SR [Taalat, 2013].

Cependant, lors du fonctionnement d'une diode pin il faut polariser la diode pour la faire fonctionner (typiquement  $-50\text{ à }-100\text{mV}$ ). Cette polarisation entraîne un courant tunnel d'autant plus fort que la masse effective des électrons est faible. C'est notamment ce que l'on observe pour des détecteurs MCT fonctionnant dans le LWIR et le VLWIR. Or, on peut voir sur la figure 3.7 que, pour

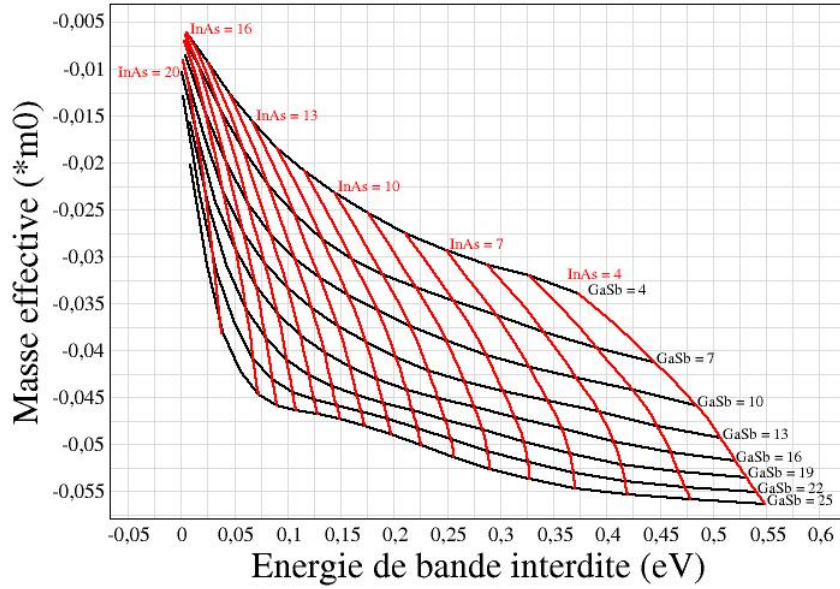


FIGURE 3.13: Masse effective des trous lourds calculée dans la direction perpendiculaire à la direction de croissance en fonction de l'énergie de bande interdite du SR.

certaines des structures SR, la masse effective des électrons devient très faible ( $m_e^* < 0,02 * m_0$ ), notamment pour des SR avec de faibles énergies de bande interdite ( $E_g < 150\text{meV}$ ). On risque alors de perdre l'avantage de la structuration SR qui permet d'avoir des masses effectives élevées pour limiter les courants tunnels.

Aussi, dans le cas d'un détecteur SR pour lequel les porteurs minoritaires sont les trous, le choix de doper p le SR ou de passer à une collecte horizontale dépendra de deux critères :

- La facilité technologique à réaliser une des deux solutions. Sachant que la collecte horizontale permettra peut-être de résoudre les problèmes de passivation présents dans la réalisation des SR.
- La masse effective des électrons dans la direction horizontale pour avoir une masse effective suffisamment importante pour limiter efficacement les courants tunnels.



### 3.3 ABSORPTION SOUS CHAMP

Le SR est la zone active d'une jonction pin. Il est donc soumis à la présence d'un champ électrique au niveau de la zone de charge d'espace (ZCE). Ce champ sera augmenté lors de la polarisation du composant à sa tension de fonctionnement. La présence du champ électrique va modifier le potentiel de la structure et donc sa structure de bande et ses fonctions d'onde. Il est donc important d'intégrer une modélisation sous champ à notre code **kp**.

#### 3.3.1 Présentation d'une structure sous champ et des problèmes de modélisation associés

Sous l'effet du champ électrique, l'Hamiltonien SR de l'équation de Schrödinger devient :

$$H_{SR} = \frac{p^2}{2 * m_0} + V_c(\vec{r}, z) + V_{VB}(z) + \vec{F} \cdot \vec{r} \quad (3.9)$$

Où  $\vec{r}$  est l'opérateur position,  $\vec{F} = q\vec{E}$  représente le champ appliqué, d'amplitude  $E$  et  $q$  est la charge élémentaire de l'électron. Le potentiel du SR a alors la forme représentée sur la figure 3.14.

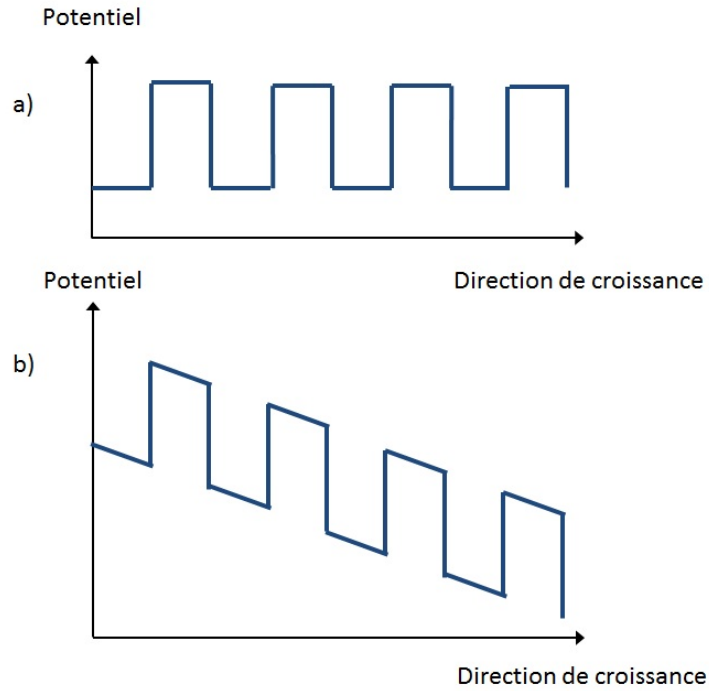


FIGURE 3.14: Potentiel de la structure SR : (a) sans champ électrique, (b) avec un champ électrique.

Lors de mon calcul de l'équation de Schrödinger, j'ai supposé les conditions aux limites périodiques. Cette hypothèse exprime le fait que l'on modélise une seule période du SR et que l'on suppose qu'aux limites de cette période, la structure se

répète indéfiniment.

Dans ce cadre, le choix des fonctions de Bloch pour exprimer nos fonctions d'onde (équation 3.15) est bien adapté. En effet, les fonctions de Bloch sont délocalisées sur l'ensemble de la structure dans l'espace réel, comme le montre la figure 3.15 et sont donc adaptées à la modélisation d'une structure périodique infinie.

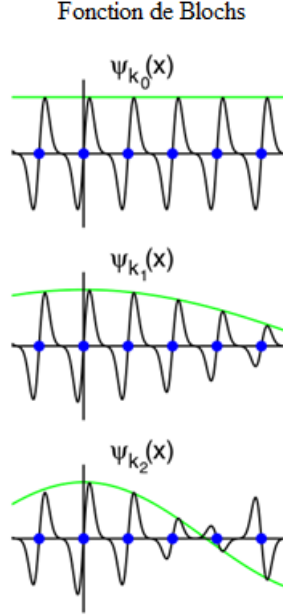


FIGURE 3.15: Schéma représentant les trois premières fonctions de Bloch de notre base.

Cependant, dans le cas d'une structure sous champ, la périodicité du potentiel dans la direction de croissance est brisée. La perte de périodicité peut se voir sur la figure 3.14. Sans champ appliqué, si on translate la période unitaire dans la direction de croissance d'une distance  $d$ , on retrouve exactement la même période. Une fois le champ appliqué, ceci n'est plus vrai. La condition aux limites périodiques n'est plus valable et donc l'utilisation comme base des fonctions de Bloch est mal adaptée.

Une autre manière d'aborder ce problème consiste à se placer du point de vue des équations. Le potentiel qui apparaît dans l'équation de Schrödinger, du fait de l'application d'un champ électrique, contient l'opérateur position  $r$ . L'effet du champ électrique étant proportionnel à l'opérateur position, c'est donc un effet très localisé dans l'espace réel. Alors, si on cherche à exprimer ce potentiel dans une base de fonctions d'onde délocalisées, on obtient des éléments de matrices divergents. De manière plus précise, le vecteur position peut être exprimé de la manière suivante dans la base des fonctions de Bloch  $u_{n,\vec{k}}$  [Foreman, 2000] :

$$\langle u_{n',\vec{k}}^* | r | u_{n,\vec{k}} \rangle = \frac{\hbar}{im_0} \frac{\pi_{nn'}(\vec{k})}{E_n(\vec{k}) - E_{n'}(\vec{k})} \quad (3.10)$$

$\pi_{nn'}(\vec{k})$  est définie de la manière suivante :

$$\pi_{nn'}(\vec{k}) = \langle u_{n',\vec{k}}^* | \pi | u_{n,\vec{k}} \rangle \quad (3.11)$$

et  $\pi$  est le moment cinétique :

$$\pi = \mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m_0c^2} \left( \boldsymbol{\sigma} \times \frac{\partial V}{\partial \vec{r}} \right) \quad (3.12)$$

Où  $\mathbf{p}$  est l'opérateur quantité de mouvement,  $V$  est le potentiel de la structure et  $\boldsymbol{\sigma}$  sont les matrices de spin de Pauli.

Cet élément de matrice va tendre vers l'infini pour toutes les bandes dégénérées, i.e.  $E_n(\vec{k}) = E_{n'}(\vec{k})$ . La présence de ces éléments va alors faire diverger la diagonalisation de la matrice  $\mathbf{kp}$ , ce qui donnera des résultats erronés.

### 3.3.2 Solution pour la modélisation d'une structure sous champ

La solution choisie pour résoudre le problème est de considérer le potentiel périodique comme montré sur la figure 3.16. Les conditions aux limites périodiques sont alors à nouveau vérifiées. Il existe cependant une limite à cette représentation du potentiel. A cause de notre hypothèse, au moment où le potentiel décrit se répète, des effets de bords apparaissent. Ces derniers n'existent pas dans la réalité.

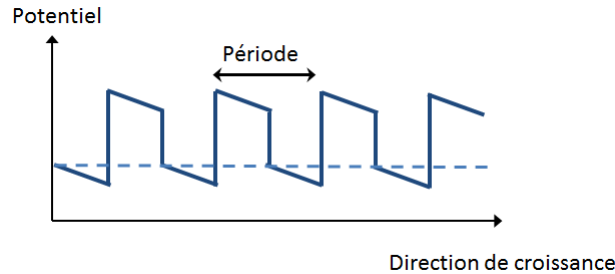


FIGURE 3.16: Représentation schématique du potentiel modélisé par notre calcul.

Cette solution a été choisie du fait de sa facilité d'application. De plus, si on regarde les fonctions d'onde sous champ dans la période (figure 3.17), on peut voir que celles-ci dans le cas d'un SR GaSb-rich sont fortement localisées dans le SR. Elles ressentiront donc peu ces effets de bord. Nous allons voir que cette représentation du potentiel est suffisante pour décrire partiellement les modifications du spectre d'absorption des structures SR GaSb-rich sous champ.

Cependant, dans le cas d'un SR InAs-rich, la fonction d'onde d'électron est fortement délocalisée sur la structure, cette solution de modélisation du champ électrique ne conviendra donc pas pour cette structure, car ces fonctions d'onde

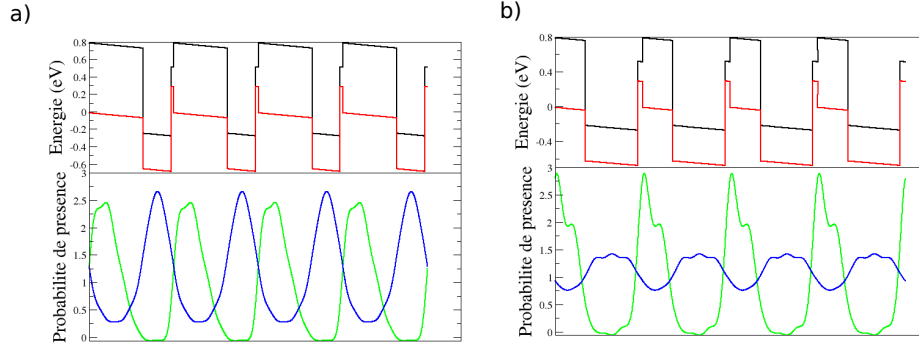


FIGURE 3.17: Fonction d'onde de la première bande d'électrons (bleue) et de trous (vert) sous champ pour a) un SR GaSb-rich (10 MC d'InAs / 19 MC de GaSb) b) un SR InAs-rich (7 MC d'InAs / 4 MC de GaSb) avec de l'InSb dans la période permettant de compenser les contraintes. Je représente aussi le potentiel de la période simulée avec en noir le niveau des bandes de conduction des matériaux dans la période et en rouge le niveau des bandes de valence des matériaux dans la période.

ressentiront fortement les effets de bord. Une solution pour la modélisation sous champ d'une structure SR InAs-rich est alors d'exprimer l'hamiltonien SR sur une base de fonctions localisées dans l'espace réel : les fonctions de Wannier (figure 3.18). Cette solution est par contre beaucoup plus compliquée à mettre en place.

Pour la solution que nous avons choisie, du point de vue du potentiel, localement le champ est considéré constant et on le fait varier par "marches". La figure 3.19 montre la manière dont le potentiel réel est représenté. La discrétisation retenue pour modéliser le potentiel sous champ de manière réaliste a été réalisée avec un pas de l'ordre de l'Ångström, c'est-à-dire du même ordre de grandeur que le paramètre de maille des matériaux InAs et GaSb.

Le potentiel ainsi défini est localement constant sur chaque pas. La formule 2.7 est donc applicable pour trouver les fonctions d'onde et la structure de bande du SR. La continuité des fonctions d'onde est cependant vérifiée à chaque variation du potentiel due aux "marches" représentant la mise sous champ électrique de la structure :

$$\Psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}_{i-}) = \Psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}_{i+}) \quad (3.13)$$

Où les points  $\vec{r}_{i+}$  et  $\vec{r}_{i-}$  sont les positions avant et après une des "marches" de discrétisation du potentiel sous champ.

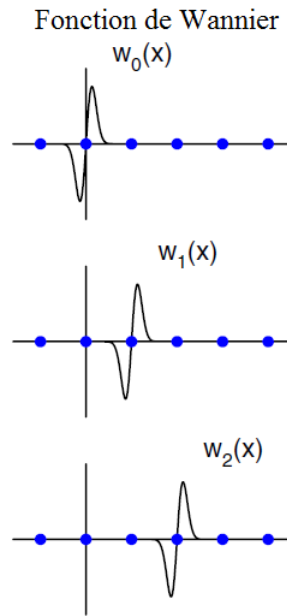


FIGURE 3.18: Schéma représentant les trois premières fonctions de Wannier.

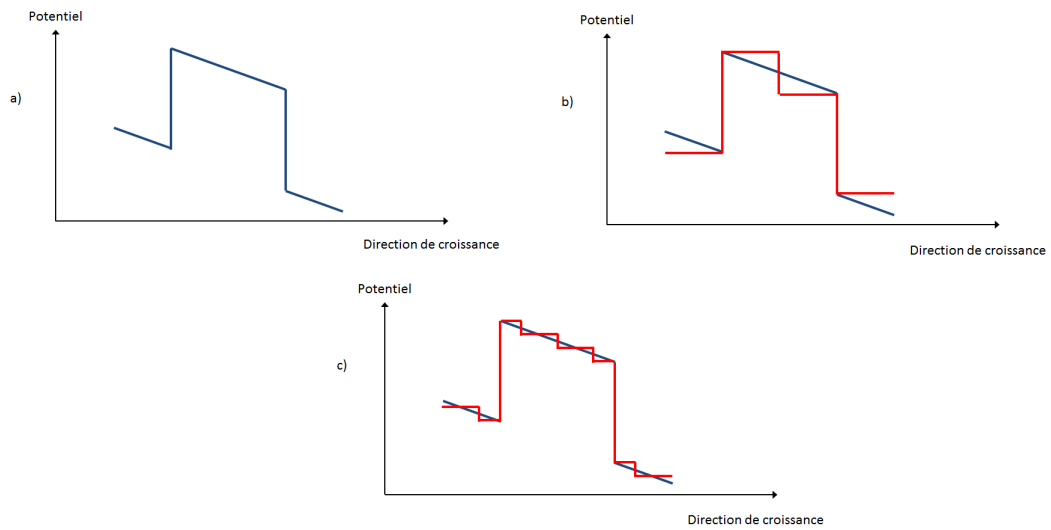


FIGURE 3.19: Représentation schématique de la méthode de calcul de la structure sous champ. a) Potentiel réel. b) en bleu potentiel réel et en rouge potentiel calculé avec un pas de 2 points par matériau. c) en bleu potentiel réel et en rouge potentiel calculé avec un pas de 4 points par matériau.

### 3.3.3 Résultats pour l'absorption sous champ

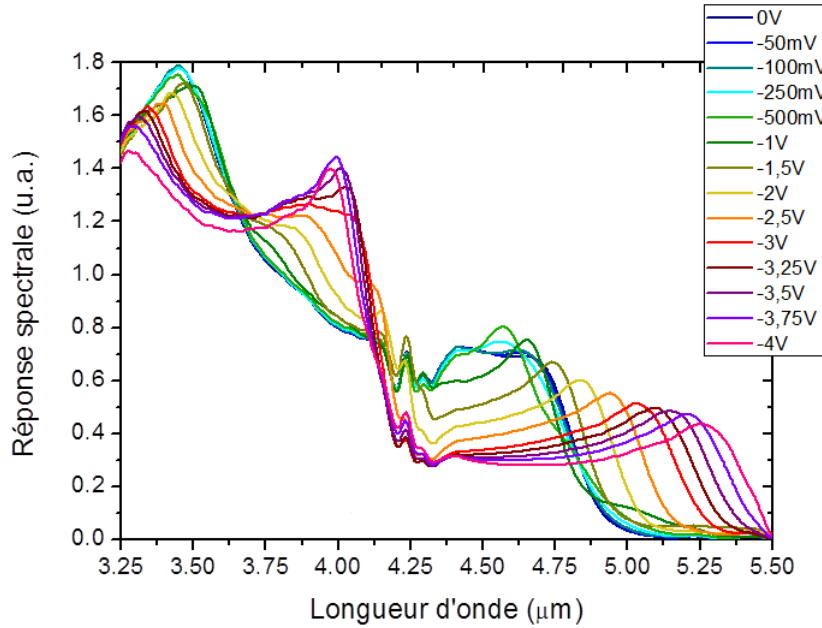


FIGURE 3.20: Réponse spectrale mesurée à 80K pour une structure GaSb-rich (9,5 MC d'InAs / 21,5 MC de GaSb) en fonction de la longueur d'onde à différentes tensions de polarisation de 0 à -4 V.

Des mesures de réponse spectrale ont été réalisées pour différentes tensions de polarisation à l'IES sur une structure SR avec 9,5 MC d'InAs et 21,5 MC de GaSb et une zone active de 500 nm d'épaisseur à 80K. L'application du champ électrique tend à localiser les fonctions d'onde sur un certain nombre de périodes du SR : les fonctions d'onde ne sont plus délocalisées sur l'ensemble de la structure. Ceci a trois effets sur le coefficient d'absorption et donc aussi sur le rendement quantique d'une structure SR [Voisin *et al.*, 1988; Bleuse *et al.*, 1988] :

- Un décalage de la courbe vers les hautes longueurs d'onde. On peut d'ailleurs voir cet effet sur la figure 3.20 : à partir d'une tension de polarisation de -1 V, la courbe se décale vers de plus hautes longueurs d'onde. Notamment, la longueur d'onde de coupure due à la transition E1-HH1 passe de 4,85  $\mu\text{m}$  à 0 V à une valeur de 5,37  $\mu\text{m}$  pour -4 V.
- Une diminution du niveau d'absorption due à une diminution du recouvrement des fonctions d'onde.
- Une oscillation du coefficient d'absorption, connue sous le nom d'échelle de Wannier-Stark, avec une période de  $F^{-1}$ , où F est l'amplitude du champ appliqué visible sur les mesures de réponse spectrale par la diminution du pic à 3,5  $\mu\text{m}$  et l'apparition d'un pic à 4  $\mu\text{m}$ .

Ces effets sont tous visibles sur les réponses spectrales mesurées. Je présente sur la

figure 3.21 les coefficients d'absorption calculés sous l'effet d'un champ électrique par mon modèle.

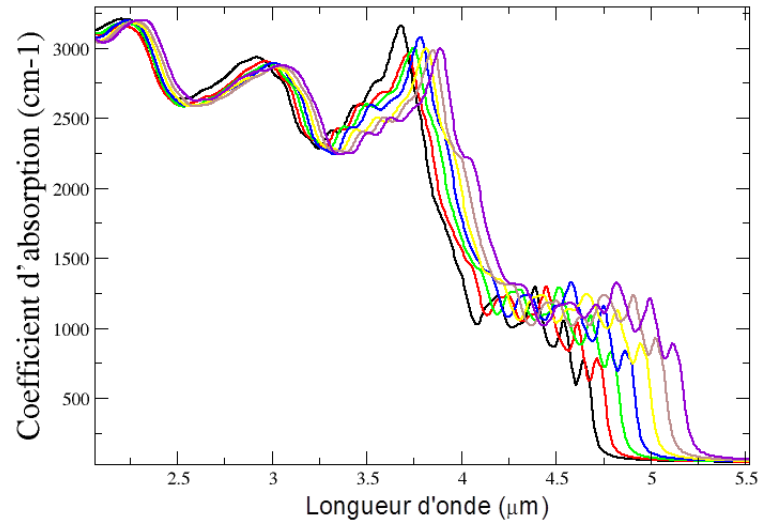


FIGURE 3.21: Coefficient d'absorption calculé à 80K d'une structure GaSb-rich (9,5 MC d'InAs / 21,5 MC de GaSb) en fonction de la longueur d'onde à différentes tensions de polarisation de 0 à -4 V.

Avec mon modèle actuel, je retrouve le décalage de la courbe vers les plus hautes longueurs d'onde, notamment au niveau de l'énergie de bande interdite. Cependant, mon modèle ne rend compte ni de la diminution attendue du niveau d'absorption ni de l'oscillation due à l'effet Wannier-Stark. Ce résultat préliminaire tend à indiquer que notre représentation actuelle de la structure SR sous champ, nous permet de rendre compte du décalage de l'énergie de bande interdite mais pas de l'effet d'échelle de Wannier-Stark.

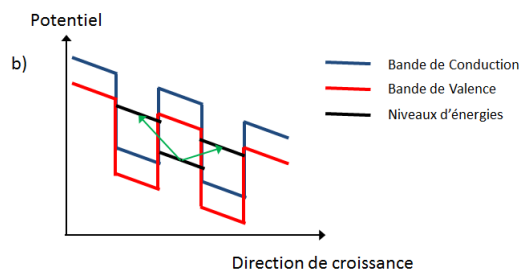


FIGURE 3.22: Schéma des transitions dans la structure SR sous champ à l'origine des oscillations Wannier Stark.

Cette absence des oscillations Wannier-Stark vient a priori de notre représentation de la période du SR. En effet, notre code ne permet actuellement pas de représenter plus d'une seule période du SR. Or, les oscillations Wannier-Stark apparaissent du fait de transitions entre deux périodes différentes, comme présenté

sur la figure 3.22. La mise sous champ du SR rend possible ces transitions d'une période à la période adjacente jusque là interdites.

Il faudra donc passer à une représentation du potentiel sur plusieurs période, 3 périodes pour rendre compte des transitions permises par la mise sous champ de la structure, pour rendre compte des oscillations Wannier-Stark.

Enfin, pour réaliser une modélisation de l'effet du champ électrique plus précise et ceci pour n'importe quelle épaisseur de période du SR, il faudra passer à une représentation sur une base de fonction de Wannier de l'hamiltonien SR.



### 3.4 PROPOSITION D'UNE STRUCTURE SUPERRÉSEAU POUR LE LWIR À 80K

Lors de cette partie, je vais choisir plusieurs structures SR avec une longueur d'onde de coupure adressant le LWIR. Les avantages recherchés seront :

- Une longueur d'onde de coupure entre  $9,5\ \mu\text{m}$  et  $14\ \mu\text{m}$ , soit des énergies de bande interdite comprises entre  $130\ \text{meV}$  et  $88\ \text{meV}$ .
- Un taux de recouvrement des fonctions d'onde élevé pour avoir un niveau d'absorption élevé.
- Une masse effective de porteurs suffisamment faible pour ne pas limiter la collecte, mais permettant aussi de limiter l'apparition de courants tunnels.

La figure 3.23 présente les énergies de bande interdite en fonction de l'épaisseur d'InAs et de GaSb dans la période à 80K.

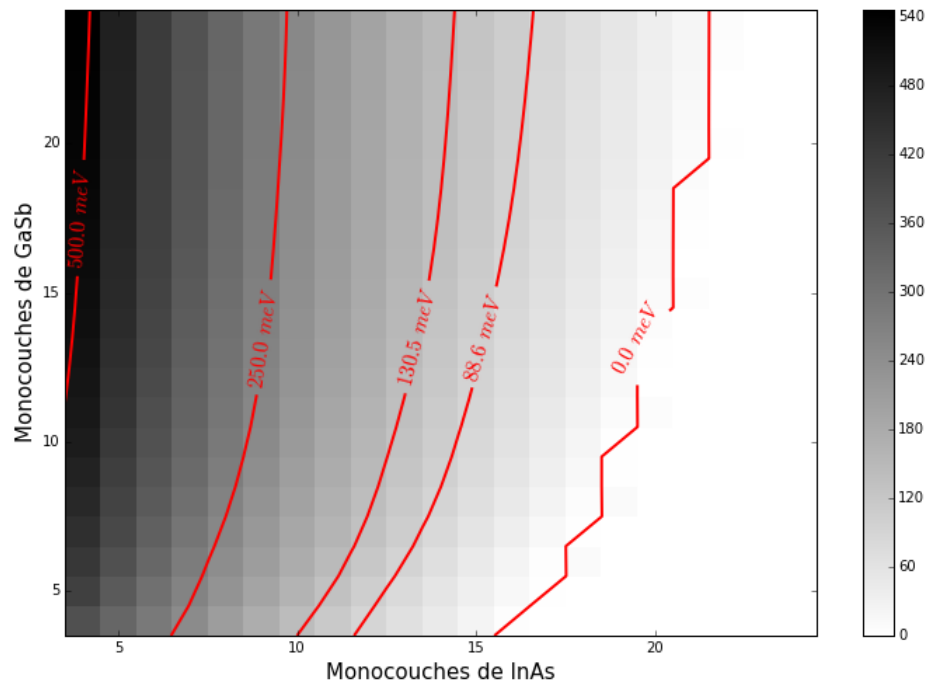


FIGURE 3.23: Énergie de bande interdite du SR en fonction de l'épaisseur d'InAs et de GaSb dans la période à 80K.

On peut observer que c'est surtout l'épaisseur d'InAs dans la période qui fixe l'énergie de bande interdite du SR. C'est un effet qui était remarquable sur les trois structures SR InAs/GaSb étudiées dans ce manuscrit. Sur ces trois structures, qui ont la même énergie de bande interdite, l'épaisseur d'InAs varie peu (7 ou 10 MC) alors que l'épaisseur de GaSb varie beaucoup (4, 10 ou 19 MC). De manière générale, lors de la croissance du SR, une attention particulière, devra être portée au contrôle de l'épaisseur d'InAs pour obtenir la longueur d'onde de coupure voulue. En effet, on peut observer sur la figure 3.23 qu'une faible variation sur l'épaisseur

d'InAs dans la période entraîne une forte variation de l'énergie de bande interdite. Ce contrôle de l'épaisseur sera d'autant plus critique lorsque l'on souhaitera réaliser des détecteurs grand format et haute longueur d'onde.

Enfin, l'épaisseur de GaSb permettra de fixer la valeur de la masse effective. Plus l'épaisseur de GaSb est importante, plus la valeur des masses effectives des porteurs sera importante. Cependant, il faudra aussi prendre en compte le taux de recouvrement des fonctions d'onde de la structure. La figure 3.24 présente le taux de recouvrement des fonctions d'onde de la première bande d'électron et de la première bande de trous. On peut voir que ce taux diminue quand l'épaisseur d'InAs ou de GaSb dans la période augmente. Deux possibilités s'offrent alors :

- soit on réalise une structure GaSb-rich en supposant que de manière semblable aux résultats obtenus dans le MWIR, les porteurs minoritaires sont des électrons. Dans ce cas, les masses effectives des électrons seront importantes, ce qui permettra de limiter les courants tunnels et ne gênera pas la collecte car les porteurs sont des électrons. Cependant, l'épaisseur de période sera trop importante, le SR aura alors un comportement plus proche du Multi-Puits Quantique. Les porteurs seront alors fortement localisés dans l'InAs pour les électrons et dans le GaSb pour les trous, le recouvrement entre leurs fonctions d'onde sera très faible et ceci limitera la capacité d'absorption de ce type de structure comme le montre la figure 3.24.
- soit on réalise une structure InAs-rich, dans ce cas là on aura une absorption plus élevée. Cependant, si de la même manière on suppose que l'on va obtenir un structure résiduelle n comme dans le MWIR, les porteurs minoritaires seront des trous avec des masses effectives dans la direction de croissance très élevées et qui limiteront la collecte. Mais nous avons vu qu'une solution est de doper p la zone active.

En conclusion, je propose donc de réaliser (figure 3.23) :

- une structure SR InAs-rich avec une épaisseur de 12 MC d'InAs et de 7 MC de GaSb pour une détection à 9,5  $\mu\text{m}$ .
- une structure SR InAs-rich avec une épaisseur de 15 MC d'InAs et de 11 MC de GaSb pour une détection à 14  $\mu\text{m}$ .

Les figures 3.25 et 3.26 présentent les coefficients d'absorption simulés de ces structures en fonction de l'énergie du photon incident, ainsi que les structures de bandes correspondantes. Les oscillations observées sur les coefficients d'absorption calculés, notamment à basse énergie sur le coefficient d'absorption de la figure 3.25, ne sont pas dues à un phénomène physique mais sont un effet résiduel du calcul. Le niveau d'absorption dans ces structures (entre 1500 et 2000  $\text{cm}^{-1}$ ) est suffisant pour réaliser des détecteurs IR performants. A titre de comparaison Klipstein *et al* présente une mesure du coefficient d'absorption pour une structure SR InAs-rich (14,4 MC d'InAs

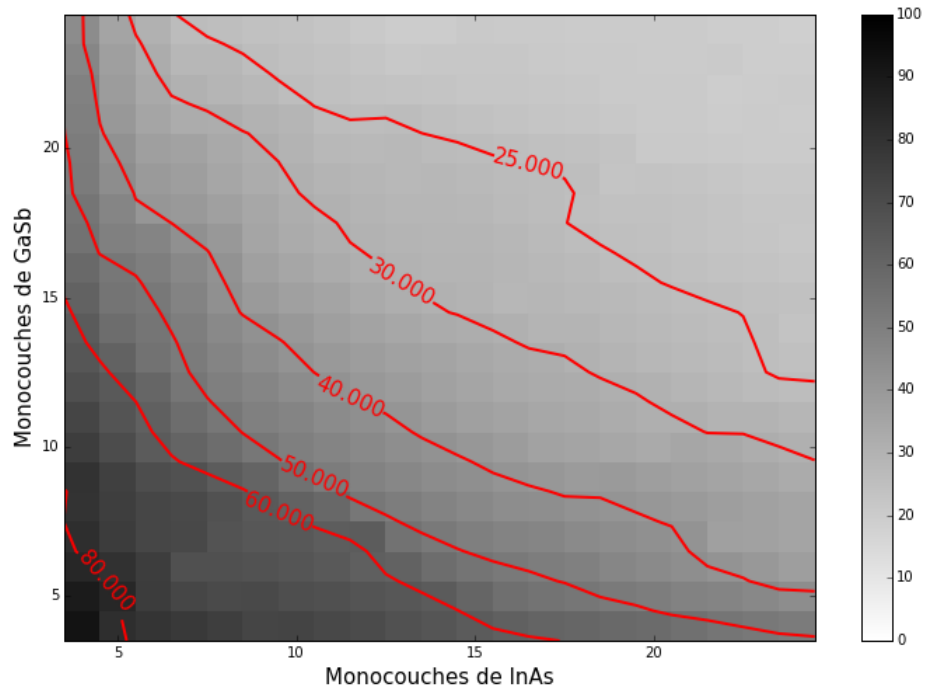


FIGURE 3.24: Recouvrement des fonctions d'onde (en %) de la première bande d'électron et de la première bande de trou en fonction de l'épaisseur d'InAs et de GaSb dans la période à 80K.

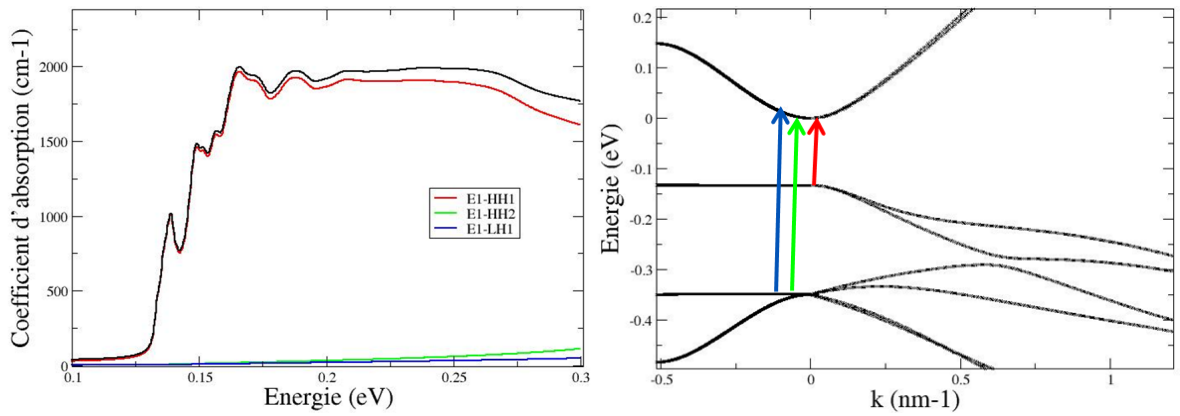


FIGURE 3.25: Coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde pour une structure SR InAs/GaSb (12 MC d'InAs / 7 MC de GaSb) à 80K calculé pour une polarisation  $[1,0,0]$ . Sont aussi représentées les contributions des différentes transitions entre la première bande de conduction et les différentes bandes de valence.

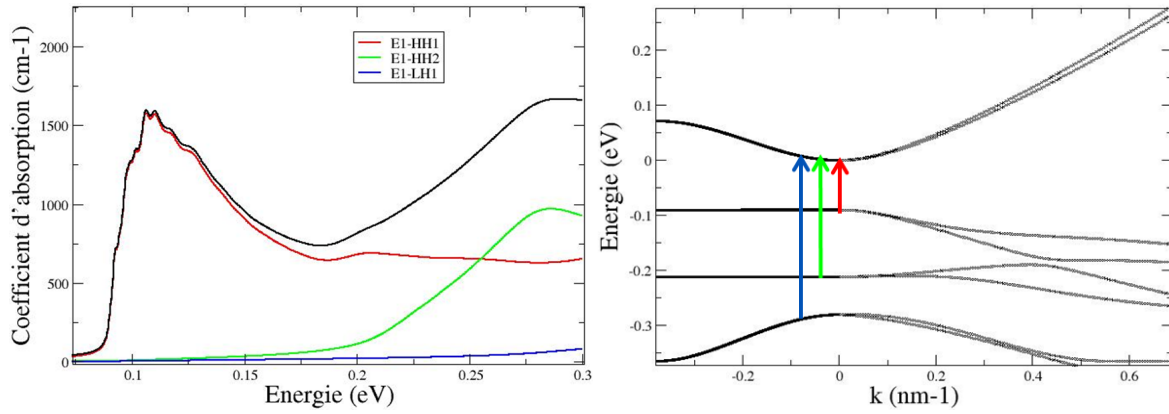


FIGURE 3.26: Coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde pour une structure SR InAs/GaSb (15 MC d'InAs / 11 MC de GaSb) à 80K calculé pour une polarisation  $[1,0,0]$ . Sont aussi représentées les contributions des différentes transitions entre la première bande de conduction et les différentes bandes de valence.

/ 7,2 MC de GaSb) avec une longueur d'onde de coupure de  $10\mu\text{m}$  et un niveau d'absorption entre  $2000$  et  $3000\text{cm}^{-1}$  [Klipstein *et al.*, 2013].

Les coefficients d'absorption ont été calculé pour une énergie de photon incident compris entre  $0,01$  et  $0,3$  eV ce qui correspond à un domaine centré sur la fenêtre spectrale du LWIR ( $8$  à  $12\mu\text{m}$ ). On peut observer que pour la structure SR 12 MC d'InAs / 7 MC de GaSb, sur la figure 3.25, la transition qui participe principalement à l'absorption est la transition fondamentale  $E1\text{-HH}1$ . Alors que pour l'autre SR (15 MC d'InAs / 11 MC de GaSb), sur la figure 3.26, entre  $0,1$  et  $0,2$  eV c'est la transition  $E1\text{-HH}1$  qui contribue seule à la transition puis à partir de  $0,2$  eV la transition  $E1\text{-HH}2$  participe et devient même majoritaire à partir de  $0,25$  eV. Ceci explique alors la forme particulière du coefficient d'absorption de la structure SR 15 MC d'InAs / 11 MC de GaSb. Pour bien comprendre cette forme deux effets sont à prendre en compte :

- la forme de "pic" de la transition  $E1\text{-HH}1$  dû, comme on l'a vu au chapitre 2, à la forte localisation des trous dans la direction  $k_x$ . Cette forte localisation des trous étant due à la forte épaisseur de l'InAs dans la période (15 MC d'InAs  $\approx 4,5$  nm).
- l'écart en énergie entre les deux bandes de trous  $\text{HH}1$  et  $\text{HH}2$ . De ce fait la contribution de la transition  $E1\text{-HH}2$  n'intervient que pour des énergies de photon plus élevées.

On s'attend enfin à retrouver cette forme particulière du coefficient d'absorption lors de mesures expérimentales.

Aussi dans un premier temps, j'ai proposé à l'IES de réaliser ces structures selon le protocole présenté lors du deuxième chapitre : la croissance du SR est réalisée sur seulement un quart de wafer pour obtenir d'un côté la structure SR sur son substrat et de l'autre son substrat associé seul. Ces premières réalisations permettront de vérifier, par des mesures de PL et de spectres d'absorption, les

longueurs d'onde prédites par le modèle ainsi que leur niveau d'absorption. Dans un second temps, il faudra fabriquer des monoéléments détecteurs avec ces structures et réaliser des réponses spectrales calibrées pour juger de la qualité de la collecte des photoporteurs dans ces composants.

Dans le tableau 3.3, je présente une comparaison entre mon code et des résultats de la littérature pour la longueur d'onde de coupure de SR InAs/GaSb dans le LWIR et le VLWIR. Pour le LWIR, mes résultats de modélisation de la longueur d'onde de coupure sont en accord avec les résultats expérimentaux du groupe CQD mais pas du JPL et du SCD. Cependant, on peut voir que les longueurs d'onde annoncées par les différents groupes sont assez semblables (entre 10 et 12  $\mu\text{m}$ ) alors que les structures SR sont sensiblement différentes (13 MC d'InAs / 7 MC de GaSb pour le CQD et 14 MC d'InAs / 7 MC de GaSb pour le JPL et le SCD). D'après la figure 3.23, on voit que dans le LWIR, une variation de l'épaisseur d'1 MC d'InAs entraîne une variation de la longueur d'onde de coupure de 3 à 4  $\mu\text{m}$ . Aussi, un SR avec 14 MC d'InAs et 7 MC de GaSb aurait, d'après mon modèle, une longueur d'onde de coupure de 15  $\mu\text{m}$ . En conclusion, il semble que les SR développés au sein de CQD soient plus matures d'un point de vue maîtrise des croissances. Cela me permet d'être relativement confiant dans les résultats de mon code pour les longueurs d'onde de coupure de SR InAs/GaSb dans le LWIR. Ces derniers devront bien entendu être validés grâce à la réalisation à l'IES de structures SR LWIR dont le rapport R entre les épaisseurs d'InAs et de GaSb dans la période sera parfaitement connu.

Pour le VLWIR, on peut voir que mon modèle donne une longueur d'onde de coupure de 22  $\mu\text{m}$  pour une valeur mesurée de 17  $\mu\text{m}$ . Il faut cependant prendre en compte qu'un écart dans les longueurs d'onde de 5  $\mu\text{m}$  correspond à un décalage de 13 meV et que l'on peut voir sur l'abaque des énergies de bande interdite (figure 3.23), que dans le VLWIR, une variation d'1 MC d'InAs entraîne une variation de 20 meV. Cet écart peut donc à nouveau être expliqué par l'incertitude sur les épaisseurs des MC d'InAs et de GaSb dans la période.

TABLE 3.3: Comparaison des longueurs d'onde de coupure à 80K de SR InAs/GaSb dans le LWIR et le VLWIR entre mon modèle et la littérature.

Groupe	Épaisseur InAs (MC)	Épaisseur GaSb (MC)	$\lambda_c$ mesuré ( $\mu\text{m}$ )	$\lambda_c$ calculé ( $\mu\text{m}$ )
CQD [Nguyen <i>et al.</i> , 2007]	13	7	11	11,6
CQD [Manurkar <i>et al.</i> , 2010]	13	7	12	11,6
CQD [Hood <i>et al.</i> , 2005]	14	5	17	22
JPL [Gunapala <i>et al.</i> , 2011]	14,5	7	11,5	15,1
SCD [Klipstein <i>et al.</i> , 2013]	14,4	7,2	10	15,1

### 3.5 CONCLUSION

Dans ce chapitre, j'ai développé des modèles pour calculer les masses effectives et la concentration de porteurs intrinsèques dans le SR InAs/GaSb et présenté des abaques de valeurs de ces propriétés intrinsèques pour différentes structures SR avec des énergies de bande interdite dans le MWIR et le LWIR. De plus, les calculs de densité d'états m'ont permis de retrouver le fonctionnement 3D du SR InAs-rich et 2D du SR GaSb-rich.

Des mesures réalisées au sein de notre équipe ont montré que, malgré son niveau d'absorption plus élevé, le SR InAs-rich présente le rendement quantique le plus faible comparé aux structures SR symétrique et GaSb-rich. L'analyse des masses effectives a alors permis de comprendre l'origine des faibles rendements quantiques du SR InAs-rich et de proposer des solutions à ce problème. L'abaque des masses effectives m'a aussi permis de montrer que les masses des SR InAs/GaSb sont toujours supérieures à celles des autres matériaux massifs à énergie de bande interdite équivalente dans le MWIR et le LWIR. Ce résultat confirme l'avantage des SR InAs/GaSb par rapports aux autres détecteurs pour la limitation des courants tunnels, qui peuvent être un facteur fortement limitant pour les détecteurs IR, notamment dans le LWIR.

A terme, notre modèle se proposera de représenter le transport dans les photodiodes SR InAs/GaSb, c'est pourquoi j'ai développé une solution pour adapter mon code **kp 18** bandes pour modéliser la mise sous tension de la zone d'absorption de la photodiode. J'ai ensuite valider les hypothèses alors faites, en comparant l'effet du champ électrique sur les SR GaSb-rich entre des réponses spectrales mesurées et

des absorptions calculées à des tensions de polarisation différentes. Pour aller plus loin dans la modélisation de ces structures sous champ, il sera nécessaire d'exprimer l'hamiltonien SR sur la base des fonctions de Wannier.

Enfin, j'ai présenté des abaques d'énergie de bande interdite et de recouvrement des fonctions d'onde d'électron et de trou en vue de proposer des structures SR InAs/GaSb pour la détection dans le LWIR. Ces abaques m'ont permis de voir que c'est l'épaisseur d'InAs dans la période qui fixe principalement l'énergie de bande interdite de la structure SR. De plus, pour une détection dans le LWIR, les SR InAs-rich seront les structures les plus adaptées, car les structures GaSb-rich dans le LWIR ont des recouvrements de fonctions d'onde trop faibles. A la vue de ces résultats, j'ai proposé deux structures SR InAs/GaSb avec une longueur d'onde de coupure de 9,5  $\mu\text{m}$  et 14  $\mu\text{m}$  à 80K. Ces structures seront réalisées et caractérisées par l'ONERA et l'IES dans le cadre des prochaines thèses dédiées aux photodétecteurs SR.

## CONCLUSION GÉNÉRALE ET PERSPECTIVES

---

Ce travail de thèse s'inscrit dans une dynamique française pour le développement des détecteurs SR InAs/GaSb. A la fin de l'année 2012, trois thèses ont alors commencé en même temps dans le but d'améliorer la compréhension du matériau et la qualité des réalisations de croissance faites à l'IES.

Le chapitre 1 présente le contexte de ce travail. Je fais alors un rappel général de la détection IR et des besoins actuels de cette filière tels que l'amélioration des performances intrinsèques, l'augmentation de la température de fonctionnement et l'augmentation du format des matrices. La structure SR InAs/GaSb, qui est un empilement de type III, permet de répondre à ces besoins. Premièrement, l'alignement particulier de jonction entre l'InAs et le GaSb permet d'adresser, en changeant l'épaisseur de la période, les longueurs d'onde allant du SWIR jusqu'au LWIR. Ensuite, pour un fonctionnement dans le LWIR et le VLWIR, le SR présente des masses effectives plus élevées que les matériaux massifs à longueur d'onde équivalente. Ceci est un avantage pour la détection, car ces fortes masses limitent les courants tunnels qui sont une source de bruit importante à ces longueurs d'onde. De plus, théoriquement le SR présente un faible taux de recombinaison Auger, ce qui permet d'améliorer le temps de vie des porteurs. Enfin, l'utilisation de matériau III-V suppose une grande uniformité de réalisation des SR InAs/GaSb, permettant la réalisation de matrices grands formats. Cependant, les détecteurs SR actuels n'atteignent pas les performances attendues. Il existe donc un besoin de modélisation. Je fais alors une présentation des différentes méthodes de modélisation qui ont été utilisées dans la littérature pour modéliser les SR InAs/GaSb, ainsi que de leurs limitations. Le modèle que je veux réaliser doit être capable de représenter de manière fiable et rapide des SR InAs/GaSb avec de très grandes différences d'épaisseur de période. C'est pourquoi mon choix s'est porté sur un modèle **kp** 18 bandes.

Au cours du chapitre 2, je me suis intéressé à la confrontation de mes résultats théoriques à des mesures expérimentales. Dans un premier temps, je présente les structures SR qui sont étudiées dans ce manuscrit et qui ont servi à cette comparaison. Pour réaliser cette dernière j'ai choisi deux grandeurs physiques : l'énergie de bande interdite et le coefficient d'absorption. La comparaison avec les énergies de bande interdite m'a permis de choisir, d'après les valeurs données par la littérature, un ensemble de paramètres matériau. De plus, ma modélisation m'a ainsi permis de calculer les énergies de bande interdite des trois structures étudiées. Ces résultats théoriques sont comparables aux valeurs expérimentales, obtenues à l'aide de mesure de PL à 80K.

Le coefficient d'absorption m'a permis d'avoir une comparaison complète de ma structure de bande et des fonctions d'onde calculées par mon modèle avec des mesures expérimentales. Pour obtenir ces mesures, j'ai mis en place un protocole



qui permet de s'affranchir de l'influence du substrat pour obtenir le spectres d'absorption du SR seul. Enfin, j'ai obtenu des résultats comparables pour le spectre d'absorption entre mon modèle et mes mesures sur une structure SR GaSb-rich (9,5 MC d'InAs / 22,5 MC de GaSb). J'ai alors pu analyser les coefficients d'absorption des trois structures SR étudiées et notamment j'ai montré que c'est le SR InAs-rich qui a la plus forte absorption des trois structures SR étudiées.

Une fois mon modèle validé, je l'ai utilisé au cours du chapitre 3 pour modéliser des propriétés intrinsèques du SR InAs/GaSb.

J'ai calculé dans un premier temps la concentration intrinsèque de porteurs. A cet effet, j'ai calculé les densités d'états des trois structures et j'ai pu retrouver le comportement 2D du SR GaSb-rich et 3D du SR InAs-rich. J'ai alors calculé un abaque de valeur de  $n_i$  à 80K pour des structures SR avec une longueur d'onde de coupure dans le MWIR et le LWIR.

Dans un deuxième temps, je me suis intéressé aux masses effectives des électrons et des trous dans la direction de croissance et dans la direction opposée. J'ai alors pu montrer que c'est principalement l'épaisseur du GaSb dans la période qui fixe la valeur de ce paramètre pour un SR InAs/GaSb. De plus, j'ai montré théoriquement que le SR InAs/GaSb a toujours une masse effective plus élevée qu'un matériau massif à énergie de bande interdite équivalente dans la direction de croissance. J'ai ainsi validé l'avantage pour la limitation des courants tunnels du SR InAs/GaSb comparé aux autres semiconducteurs massifs. Enfin, l'analyse des masses effectives des trous du SR InAs-rich a permis de comprendre les rendements quantiques faibles obtenus avec cette structure. En effet, en raison du dopage résiduel  $n$ , les porteurs minoritaires du SR InAs-rich sont des trous et leur masse effective dans la direction de croissance très élevée devient limitante pour la collection des porteurs photo-générés. Je conclus cette partie en proposant deux solutions à ce problème : le dopage  $p$  de la structure ou une collection des porteurs dans la direction perpendiculaire à la direction de croissance.

Ensuite, en vue d'une modélisation du transport électronique d'un détecteur à SR, je me suis intéressé à la modélisation de sa zone intrinsèque sous tension. J'ai alors présenté une méthode de modélisation et expliqué les limitations de cette représentation. J'ai alors pu valider ce modèle pour la structure SR GaSb-rich, en comparant des mesures de réponses spectrales sous polarisation avec les spectres d'absorption sous champ électrique calculés.

Enfin, j'ai calculé un abaque des énergies de bande interdite pour un ensemble de structures SR InAs/GaSb. Cet abaque a montré que c'est l'épaisseur d'InAs dans la période qui fixe l'énergie de bande interdite du SR. A partir de ce résultat, j'ai proposé deux structures SR InAs-rich pour une détection dans le LWIR à 80K : un SR avec 12 MC d'InAs et 7 MC de GaSb pour obtenir une longueur d'onde de coupure de 9,5  $\mu\text{m}$  et un SR avec 15 MC d'InAs et 11 MC de GaSb pour obtenir une longueur d'onde de coupure de 14  $\mu\text{m}$ .

En conclusion, cette thèse a permis d'obtenir une meilleure compréhension du superréseau InAs/GaSb. J'ai créé un outil de modélisation qui permet de représenter les propriétés intrinsèques de SR InAs/GaSb sensibles dans le MWIR et

dans le LWIR. Pour obtenir une compréhension complète d'un détecteur, il faudra cependant développer un outil de modélisation du transport électronique. Il existe actuellement un code de transport 1D, développé au sein du III-V lab. Ce code est de type dérive-diffusion et pourra être utilisé pour les SR InAs/GaSb à certaines conditions :

- Premièrement, pour être capable de modéliser n'importe quel SR InAs/GaSb sous champ électrique, il faudra passer à une représentation de l'hamiltonien SR sur la base des fonctions de Wannier [Marzari *et al.*, 2012]. Ces fonctions sont, à l'opposé des fonctions de Bloch, localisées dans l'espace réel et permettront de modéliser sans approximation le potentiel créé par le champ électrique.
- Deuxièmement, il faudra être en mesure de modéliser la mobilité des porteurs dans le SR InAs/GaSb. Il semble que dans les SR InAs/GaSb, le facteur limitant de la mobilité soit la diffusion due aux rugosités d'interface [Szmulowicz *et al.*, 2009].

Enfin, des mesures réalisées sur des SR InAs/GaSb ont montré que cette structure présente des temps de vie faible (autour de 30 ns). Le facteur limitant de ces temps de vie pourrait être la présence de gallium dans la période. Aussi, une perspective serait d'envisager le développement de structures SR InAs/InAsSb. L'ensemble des outils que j'ai développés pourra servir à orienter la réalisation de telles structures.



## PRINCIPE DE FONCTIONNEMENT D'UNE PHOTODIODE

Au cours de cette annexe, je vais présenter les différentes structures utilisées pour la collecte des porteurs dans les détecteurs à SR InAs/GaSb.

### A.1 JONCTION PIN

La manière la plus classique pour collecter les porteurs est de réaliser une jonction PN. Cette jonction consiste en la juxtaposition d'un semiconducteur de type p et d'un semiconducteur de type n, il se crée alors une zone de charge d'espace (ZCE) entre les deux matériaux. La photodiode est alors polarisée en inverse pour bloquer le transport des porteurs majoritaires et privilégier celui des porteurs minoritaires. Sous ce format, la largeur de la zone de la ZCE dépend des dopages des zones p et n. La jonction PIN se propose alors d'élargir cette zone de charge d'espace en intercalant une zone intrinsèque ou très faiblement dopée entre les deux matériaux p et n. Les porteurs photo-générés dans la ZCE sont alors collectés grâce au champ électrique présent. La figure A.1 résume le fonctionnement d'une jonction PIN.

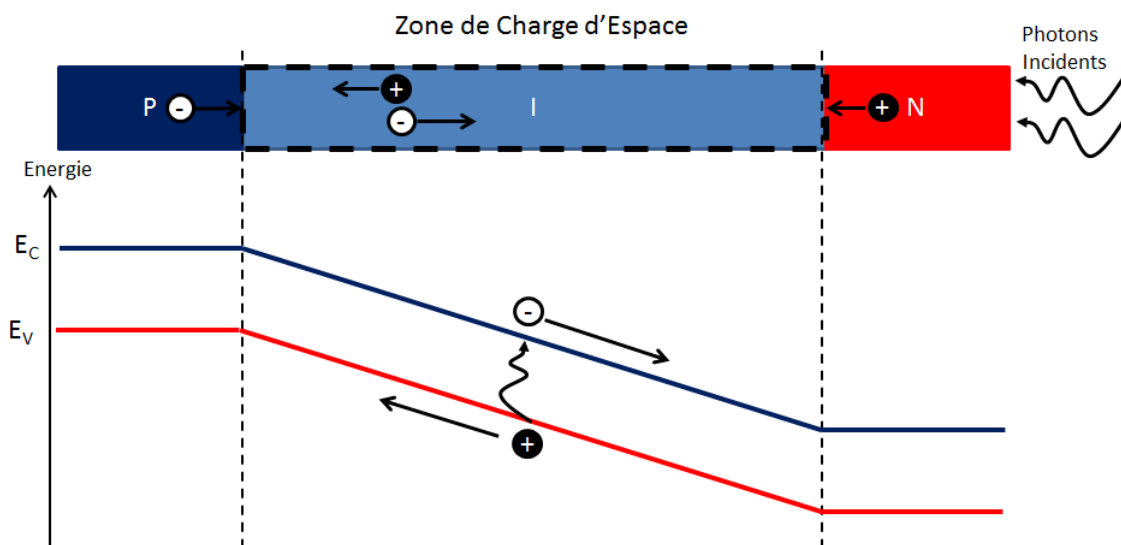


FIGURE A.1: Représentation schématique d'une jonction PIN avec son diagramme de bande associée.

### A.2 STRUCTURES À BARRIÈRE

L'intérêt d'une structure à barrière est de limiter le transport des porteurs majoritaires sans gêner celui des porteurs minoritaires à l'aide de l'introduction d'un

matériau à grande énergie de bande interdite. Ceci permet de limiter la contribution au courant d'obscurité provenant du courant de Génération-Recombinaison sans limiter le photocourant.

Je vais maintenant succinctement présenter les structures à barrières pour les SR InAs/GaSb proposées dans la littérature.

#### A.2.1 Structure nBn

Cette structure est composée d'une zone d'absorption du type n, séparée de la couche de contact de type  $n^+$  par un matériau avec une énergie de bande interdite très supérieure à celle du matériau de la zone d'absorption qui sert de barrière pour les électrons (figure A.2).

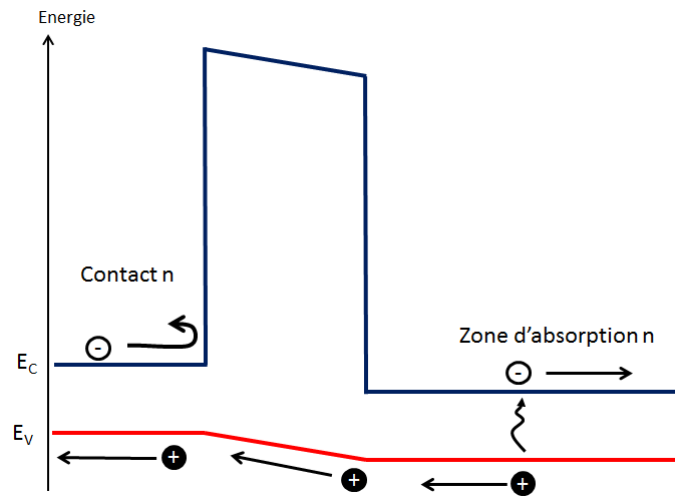


FIGURE A.2: Schéma du diagramme de bande d'une structure nBn.

Un des autres avantages de cette structure est l'absence de jonction pn, il n'y a donc plus de ZCE, ce qui a pour effet de supprimer une des contributions au courant d'obscurité : les courants Shockley Read Hall dans la zone d'absorption.

#### A.2.2 Structure M

Cette structure propose cette fois-ci d'introduire une barrière pour les trous entre une zone d'absorption de type p et un contact de type  $p^+$  (figure A.3 a). Ceci est réalisé en introduisant une fine épaisseur d'AlSb entre deux couches de GaSb du SR (figure A.3 b).

L'avantage d'une structure M sur une structure nBn vient du fait que les porteurs minoritaires sont ici des électrons. Ce qui permet d'avoir un meilleur rendement quantique pour les structures M à épaisseur de zone d'absorption équivalente.

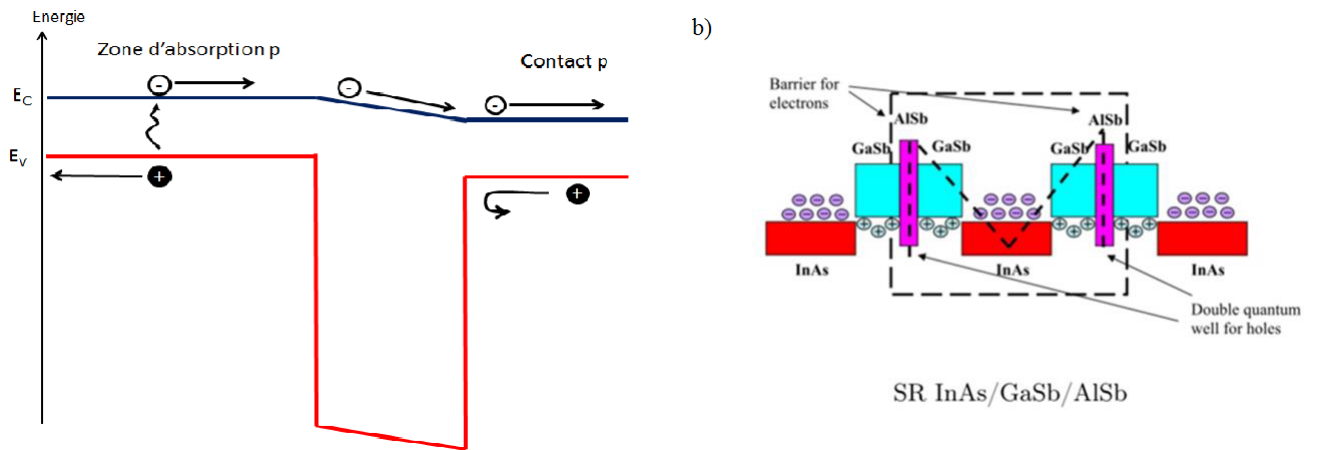


FIGURE A.3: a) Schéma du diagramme de bande d'une structure pMp. b) Empilement de la croissance pMp.

### A.2.3 Structure CBIRD

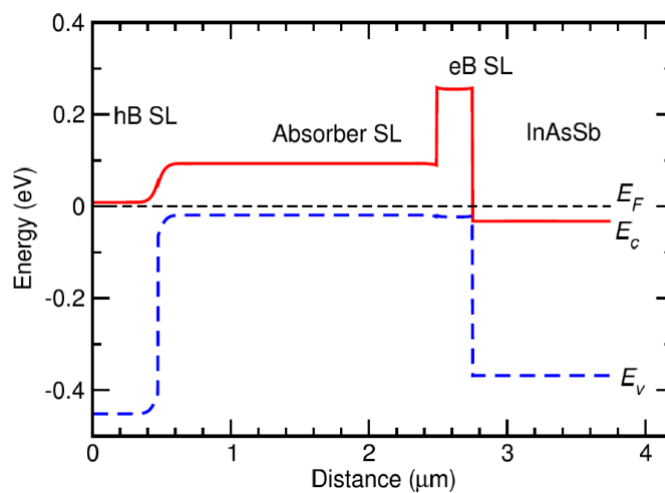


FIGURE A.4: Schéma du diagramme de bande d'une structure CBIRD.

La structure BIRD (Barrier InfraRed photoDetector) est une structure à bande bloquante équivalente à une structure nBn. La structure CBIRD (Complementary BIRD) a la particularité d'avoir deux barrières : la première bloque les électrons et laisse passer les trous et la deuxième bloque les trous et laisse passer les électrons (figure A.4).



## MATRICE $\mathbf{K_P}$

---

Dans cette annexe, je présente la matrice  $18 \times 18$  utilisée dans mon code sous la forme  $\begin{pmatrix} M1 & M2 \\ M3 & M4 \end{pmatrix}$ .

Elle est exprimée sur la base (SO  $\uparrow$ , SO  $\downarrow$ , LH  $\uparrow$ , LH  $\downarrow$ , HH  $\uparrow$ , HH  $\downarrow$ , E<sub>0</sub>  $\uparrow$ , E<sub>0</sub>  $\downarrow$ , E<sub>7</sub>  $\uparrow$ , E<sub>7</sub>  $\downarrow$ , E<sub>8</sub>, E<sub>8</sub>, E<sub>8</sub>, E<sub>8</sub>, E<sub>3</sub>, E<sub>3</sub>, E<sub>3</sub>, E<sub>3</sub>). Nous utilisons les notations suivantes :

$$\begin{cases} k_+ = k_x + i \cdot k_y \\ k_- = k_x - i \cdot k_y \end{cases} \quad (\text{B.1})$$

$$E_D = V_{VB} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (\text{B.2})$$

Les éléments de matrice non-diagonaux dus à la contrainte ont été intégrés dans cette matrice. Ce sont les éléments (0,3) et (1,3) valant  $-\frac{\sqrt{2}}{2}E_{HH}$ .



$$\mathbf{M1} = \begin{pmatrix}
E_D - \Delta_{SO} & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2} E_{HH} & 0 & 0 & 0 & -i\frac{P}{\sqrt{3}} \cdot k_+ & i\frac{P}{\sqrt{3}} \cdot k_z & 0 \\
0 & E_D - \Delta_{SO} & -\frac{\sqrt{2}}{2} E_{HH} & 0 & 0 & 0 & -i\frac{P}{\sqrt{3}} \cdot k_z & -i\frac{P}{\sqrt{3}} \cdot k_- & 0 \\
0 & 0 & E_D + E_{LH} & 0 & 0 & 0 & i\frac{P}{\sqrt{6}} \cdot k_+ & iP \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot k_z & 0 \\
0 & 0 & 0 & E_D + E_{LH} & 0 & 0 & -iP \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot k_z & i\frac{P}{\sqrt{6}} \cdot k_- & \frac{Q}{\sqrt{2}} k_+ \\
0 & 0 & 0 & 0 & E_D + E_{HH} & 0 & i\frac{P}{\sqrt{2}} k_- & 0 & -Q \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} k_z \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_D + E_{HH} & 0 & i\frac{P}{\sqrt{2}} k_+ & -\frac{Q}{\sqrt{6}} k_- \\
i\frac{P}{\sqrt{3}} \cdot k_- & i\frac{P}{\sqrt{3}} \cdot k_z & -i\frac{P}{\sqrt{6}} \cdot k_- & iP \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot k_z & -i\frac{P}{\sqrt{2}} k_+ & 0 & E_D + E_0 & 0 & i\frac{P'}{\sqrt{3}} k_- \\
-i\frac{P}{\sqrt{3}} \cdot k_z & i\frac{P}{\sqrt{3}} \cdot k_+ & -iP \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot k_z & -i\frac{P}{\sqrt{6}} \cdot k_+ & 0 & -i\frac{P}{\sqrt{2}} k_- & 0 & E_D + E_0 & -i\frac{P'}{\sqrt{3}} k_z \\
0 & 0 & 0 & \frac{Q}{\sqrt{2}} k_- & -Q\sqrt{\frac{2}{3}} k_z & -\frac{Q}{\sqrt{6}} k_+ & -i\frac{P'}{\sqrt{3}} k_+ & i\frac{P'}{\sqrt{3}} k_z & E_D + E_7
\end{pmatrix}$$

$$M2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -\frac{Q}{\sqrt{2}}k_- & Q\sqrt{\frac{2}{3}}k_z & \frac{Q}{\sqrt{6}}k_+ & i\frac{R}{2\sqrt{3}}k_+ & i\frac{R}{\sqrt{3}}k_z & -i\frac{R}{2}k_- & 0 \\ 0 & -\frac{Q}{\sqrt{2}}k_+ & 0 & \frac{Q}{\sqrt{6}}k_- & -Q\sqrt{\frac{2}{3}}k_z & -i\frac{R}{\sqrt{3}}k_z & i\frac{R}{2\sqrt{3}}k_- & 0 & -i\frac{R}{2}k_+ \\ \frac{Q}{\sqrt{2}}k_- & 0 & 0 & -\frac{Q}{\sqrt{3}}k_z & \frac{Q}{\sqrt{3}}k_+ & -i\frac{R}{2\sqrt{6}}k_+ & iR\sqrt{\frac{2}{3}}k_z & i\frac{R}{2\sqrt{2}}k_- & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{Q}{\sqrt{3}}k_- & \frac{Q}{\sqrt{3}}k_z & -iR\sqrt{\frac{2}{3}}k_z & -\frac{R}{2\sqrt{6}}k_- & 0 & i\frac{R}{2\sqrt{2}}k_+ \\ -\frac{Q}{\sqrt{6}}k_+ & \frac{Q}{\sqrt{3}}k_z & -\frac{Q}{\sqrt{3}}k_+ & 0 & 0 & -i\frac{R}{2\sqrt{2}}k_- & 0 & i\frac{R}{2}\sqrt{\frac{3}{2}}k_+ & 0 \\ Q\sqrt{\frac{2}{3}}k_z & -\frac{Q}{\sqrt{3}}k_- & -\frac{Q}{\sqrt{3}}k_z & 0 & 0 & -i\frac{R}{2\sqrt{2}}k_+ & -i\frac{R}{2\sqrt{2}}k_+ & 0 & i\frac{R}{2}\sqrt{\frac{3}{2}}k_- \\ i\frac{P'}{\sqrt{3}}k_z & -i\frac{P'}{\sqrt{6}}k_- & iP'\sqrt{\frac{2}{3}}k_z & -i\frac{P'}{\sqrt{2}}k_+ & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ i\frac{P'}{\sqrt{3}}k_+ & -iP'\sqrt{\frac{2}{3}}k_z & -i\frac{P'}{\sqrt{6}}k_+ & 0 & -i\frac{P'}{\sqrt{2}}k_- & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$M3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{Q}{\sqrt{2}}k_+ & 0 & -\frac{Q}{\sqrt{6}}k_- & Q\sqrt{\frac{2}{3}}k_z & -i\frac{P'}{\sqrt{3}}k_- & -i\frac{P'}{\sqrt{3}}k_z & -i\frac{P'}{\sqrt{3}}k_- & 0 \\ 0 & -\frac{Q}{\sqrt{2}}k_- & 0 & 0 & \frac{Q}{\sqrt{3}}k_z & -\frac{Q}{\sqrt{3}}k_+ & i\frac{P'}{\sqrt{6}}k_+ & i\frac{P'}{\sqrt{6}}k_- & i\frac{P'}{\sqrt{6}}k_+ & 0 \\ -\frac{Q}{\sqrt{2}}k_+ & 0 & 0 & 0 & -\frac{Q}{\sqrt{3}}k_- & -\frac{Q}{\sqrt{3}}k_z & -i\frac{P'}{\sqrt{6}}\sqrt{\frac{2}{3}}k_z & -i\frac{P'}{\sqrt{6}}\sqrt{\frac{2}{3}}k_z & i\frac{P'}{\sqrt{6}}k_- & 0 \\ Q\sqrt{\frac{2}{3}}k_z & \frac{Q}{\sqrt{6}}k_+ & -\frac{Q}{\sqrt{3}}k_- & \frac{Q}{\sqrt{3}}k_+ & 0 & 0 & i\frac{P'}{\sqrt{2}}k_- & i\frac{P'}{\sqrt{2}}k_- & 0 & 0 \\ \frac{Q}{\sqrt{6}}k_- & -Q\sqrt{\frac{2}{3}}k_z & \frac{Q}{\sqrt{3}}k_- & \frac{Q}{\sqrt{3}}k_z & 0 & 0 & 0 & 0 & i\frac{P'}{\sqrt{2}}k_+ & 0 \\ -i\frac{R}{2\sqrt{3}}k_- & i\frac{R}{\sqrt{3}}k_z & i\frac{R}{2\sqrt{6}}k_- & iR\sqrt{\frac{2}{3}}k_z & i\frac{R}{2\sqrt{2}}k_+ & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -i\frac{R}{\sqrt{3}}k_z & -i\frac{R}{2\sqrt{3}}k_+ & -iR\sqrt{\frac{2}{3}}k_z & i\frac{R}{2\sqrt{6}}k_+ & 0 & i\frac{R}{2\sqrt{2}}k_- & 0 & 0 & 0 & 0 \\ i\frac{R}{2}k_+ & 0 & -i\frac{R}{2\sqrt{2}}k_+ & 0 & -i\frac{R}{2}\sqrt{\frac{3}{2}}k_- & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i\frac{R}{2}k_- & 0 & -i\frac{R}{2\sqrt{2}}k_- & 0 & -i\frac{R}{2}\sqrt{\frac{3}{2}}k_+ & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$M4 = \begin{pmatrix} E_D + E_7 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_D + E_8 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_D + E_8 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_D + E_8 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E_D + E_8 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_D + E_8 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_D + E_8 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_D + E_8 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_D + E_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_D + E_3 \end{pmatrix}$$



## COMPLÉMENTS AU CALCUL DE L'ABSORPTION

---

Pour obtenir la relation de dispersion il faut repartir des équations de Maxwell dépendantes du temps dans un milieu non chargé et non magnétique ( $\mathbf{J} = \rho = 0$ ) :

$$\nabla \times \vec{E}(\vec{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial t} \vec{B}(\vec{r}, t) \quad (\text{C.1})$$

$$\nabla \times \vec{B}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\epsilon_0 c^2} \frac{\partial}{\partial t} \vec{D}(\vec{r}, t) \quad (\text{C.2})$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad (\text{C.3})$$

$$\nabla \cdot \vec{E} = 0 \quad (\text{C.4})$$

On sait que les solutions des équations de Maxwell C.1, C.2, C.3 et C.4 sont des ondes planes progressives de la forme :

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} + \omega t)} \quad (\text{C.5})$$

Aussi en utilisant l'expression C.5 avec les équations de Maxwell on obtient :

$$\vec{k} \times \vec{E}(\vec{r}, t) = \omega \vec{B}(\vec{r}, t) \quad (\text{C.6})$$

$$\vec{k} \times \vec{B}(\vec{r}, t) = \frac{-\omega}{\epsilon_0 c^2} \vec{D}(\vec{r}, t) \quad (\text{C.7})$$

$$\vec{k} \cdot \vec{B} = 0 \quad (\text{C.8})$$

$$\vec{k} \cdot \vec{E} = 0 \quad (\text{C.9})$$

En multipliant à gauche l'équation C.6 par  $\vec{k}$  on a alors :

$$\vec{k} \times (\vec{k} \times \vec{E}) = \omega \vec{B} \quad (\text{C.10})$$

On simplifie la partie gauche de cette expression en utilisant l'expression vectorielle suivante et en utilisant l'équation C.9 :

$$\vec{k} \times (\vec{k} \times \vec{E}) = (\vec{k} \cdot \vec{E}) \vec{k} - k^2 \vec{E} \quad (\text{C.11})$$

$$= -k^2 \vec{E} \quad (\text{C.12})$$

Donc notre expression C.10 devient :

$$-k^2 \vec{E} = \omega \vec{k} \times \vec{B} \quad (\text{C.13})$$

en utilisant l'équation C.7 on a :

$$-k^2 \vec{E} = \omega \left( \frac{-\omega \epsilon}{\epsilon_0 c^2} \vec{E} \right) \quad (\text{C.14})$$

sachant que  $\mu_0 \epsilon_0 = \frac{1}{c^2}$ , on obtient alors le résultat suivant :

$$(k^2 - \omega^2 \mu_0 \epsilon) \vec{E} = 0 \quad (\text{C.15})$$

Les solutions de cette équation sont soit la solution évidente  $\vec{E} = 0$  (i.e. aucun champ n'est appliqué, ce qui a peu d'intérêt) ou :

$$k^2 = \omega^2 \mu_0 \epsilon \quad (\text{C.16})$$

## BIBLIOGRAPHIE

---

- ABDOLLAHI POUR, S. (2012). Type-II Indium Arsenide/Gallium Antimonide Material and Photodetectors for High Performance, High Temperature and Low Cost Infrared Detection and Imaging.
- ALLEN, L. C. (1955). Interpolation scheme for energy bands in solids. *Physical Review*, 98(4):993–996.
- BASTARD, G. (1988). Wave mechanics applied to semiconductors. *Les éditions de la Physique (CNRS, Paris, 1988)*.
- BIR, G. L., PIKUS, G. E., SHELNITZ, P. et LOUVISH, D. (1974). *Symmetry and strain-induced effects in semiconductors*, volume 624. Wiley New York.
- BLEUSE, J., BASTARD, G. et VOISIN, P. (1988). Electric-field-induced localization and oscillatory electro-optical properties of semiconductor superlattices. *Physical review letters*, 60(3):220.
- CARDONA, M. et POLLAK, F. H. (1966). Energy-band structure of germanium and silicon : The  $k \cdot p$  method. *Physical Review*, 142(2):530.
- CERVERA, C. (2011). *Le photodétecteur à superréseau InAs/GaSb pour imagerie infrarouge*. Thèse de doctorat, Université Montpellier 2, IES.
- CHANG, L., KAWAI, N., SAI-HALASZ, G., LUDEKE, R. et ESAKI, L. (1979). Observation of semiconductor-semimetal transition in InAs-GaSb superlattices. *Applied Physics Letters*, 35(12):939–942.
- CHEN, C.-N. (2005). Analytical bond orbital model : Heterobond effect on optical properties of InAs/GaSb superlattices. *Journal of Applied Physics*, 98(6).
- CHEN, G., HADDADI, A., HOANG, A.-M., CHEVALLIER, R. et RAZEGHI, M. (2015). Demonstration of type-II superlattice MWIR minority carrier unipolar imager for high operation temperature application. *Optics letters*, 40(1):45–47.
- DELAUNAY, P.-Y., NGUYEN, B. M., HOFFMAN, D. et RAZEGHI, M. (2007). 320 x 256 infrared focal plane array based on type-II InAs/GaSb superlattice with a 12  $\mu\text{m}$  cutoff wavelength. *Proc. SPIE*, 6542:654204–654204–10.
- DELMAS, M., RODRIGUEZ, J., TAALAT, R., KONCZEWICZ, L., DESRAT, W., CONTRERAS, S., GIARD, E., RIBET-MOHAMED, I. et CHRISTOL, P. (2014). Midwave infrared InAs/-GaSb superlattice photodiode with a dopant-free p–n junction. *Infrared Physics & Technology*.
- DENTE, G. C. et TILTON, M. L. (1999). Pseudopotential methods for superlattices : Applications to mid-infrared semiconductor lasers. *Journal of Applied Physics*, 86(3): 1420–1429.



- DENTE, G. C., TILTON, M. L. et AL (2002). Comparing pseudopotential predictions for InAs/GaSb superlattices. *Physical Review B*, 66(16):165307.
- DRESSELHAUS, G., KIP, A. et KITTEL, C. (1955). Cyclotron resonance of electrons and holes in silicon and germanium crystals. *Physical Review*, 98(2):368.
- FOREMAN, B. A. (1993). Effective-mass Hamiltonian and boundary conditions for the valence bands of semiconductor microstructures. *Physical Review B*, 48(7):4964.
- FOREMAN, B. A. (2000). Theory of the effective Hamiltonian for degenerate bands in an electric field. *Journal of Physics : Condensed Matter*, 12(34):R435.
- GIARD, E. (2015). *Caractérisation et orientation de la filière des détecteurs infrarouge à superréseau InAs/GaSb*. Thèse de doctorat, Université Paris Diderot (Paris 7).
- GIARD, E., RIBET-MOHAMED, I., DELMAS, M., RODRIGUEZ, J. et CHRISTOL, P. (2014a). Influence of the p-type doping on the radiometric performances of MWIR InAs/-GaSb superlattice photodiodes. *Infrared Physics & Technology*.
- GIARD, E., RIBET-MOHAMED, I., JAECK, J., VIALE, T., HAÏDAR, R., TAALAT, R., DELMAS, M., RODRIGUEZ, J.-B., STEVELER, E., BARDOU, N. et al. (2014b). Quantum efficiency investigations of type-II InAs/GaSb midwave infrared superlattice photodetectors. *Journal of Applied Physics*, 116(4):043101.
- GUNAPALA, S., TING, D., HILL, C., NGUYEN, J., SOIBEL, A., RAFOL, S., KEO, S., MUMOLO, J., LEE, M., LIU, J. et AL (2011). Large area III-V infrared focal planes. *Infrared Physics & Technology*, 54(3):155–163.
- HANSEN, G. et SCHMIT, J. (1983). Calculation of intrinsic carrier concentration in  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ . *Journal of Applied Physics*, 54(3):1639–1640.
- HAUGAN, H., ULLRICH, B., ELHAMRI, S., SZMULOWICZ, F., BROWN, G., TUNG, L. et WANG, Y. (2010). Magneto-optics of InAs/GaSb superlattices. *Journal of Applied Physics*, 107(8):083112.
- HERRING, C. (1940). A new method for calculating wave functions in crystals. *Physical Review*, 57(12):1169.
- HIRAYAMA, Y., NISHIKATA, K. et IRIKAWA, M. (1997). Strained superlattice semiconductor photodetector having a side contact structure .
- HOANG, A., CHEN, G., CHEVALLIER, R., HADDADI, A. et RAZEGHI, M. (2014). High performance photodiodes based on InAs/GaSb type-II superlattices for very long wavelength infrared detection. *Applied Physics Letters*, 104(25):1105.
- HONG, B., RYBCHENKO, S., ITSKEVICH, I., HAYWOOD, S., INTARTAGLIA, R., TASCO, V., RAINO, G. et DE GIORGI, M. (2009). Applicability of the kp method to modeling of InAs/GaSb short-period superlattices. *Physical Review B*, 79(16):165323.
- HOOD, A., RAZEGHI, M., AIFER, E. et BROWN, G. (2005). On the performance and surface passivation on type II InAs/GaSb superlattice photodiodes for the very-long-wavelength infrared. *Applied Physics Letters*, 87(15):1113.

- JANCU, J.-M., SCHOLZ, R., BELTRAM, F. et BASSANI, F. (1998). Empirical spds\* tight-binding calculation for cubic semiconductors : General method and material parameters. *Physical Review B*, 57(11):6493.
- KANE, E. (1966). Semiconductors and semimetals. Vol. 1 *Academic, New York*, page 75.
- KANE, E. O. (1956). Energy band structure in p-type germanium and silicon. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 1(1):82–99.
- KANE, E. O. (1957). Band structure of indium antimonide. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 1(4):249–261.
- KIM, H., PLIS, E., RODRIGUEZ, J., BISHOP, G., SHARMA, Y., DAWSON, L., KRISHNA, S., BUNDAS, J., COOK, R., BURROWS, D. et al. (2008). Mid-IR focal plane array based on type-II InAs/GaSb strain layer superlattice detector with nBn design. *Applied Physics Letters*, 92(18):183502.
- KINCH, M. A. (2014). The rationale for ultra-small pitch ir systems. In *SPIE Defense+ Security*, pages 907032–907032. International Society for Optics and Photonics.
- KING, D., RADFORD, W., PATTEN, E., GRAHAM, R., MCEWAN, T., VODICKA, J., BORN-FREUND, R., GOETZ, P., VENZOR, G., JOHNSON, S. et al (2006). 3rd generation 1280 x 720 FPA development status at Raytheon Vision Systems. *Defense and Security Symposium*, page 62060W.
- KLEINMAN, L. et PHILLIPS, J. C. (1960). Crystal potential and energy bands of semiconductors. III. Self-consistent calculations for silicon. *Physical Review*, 118(5):1153.
- KLIPSTEIN, p. (2015). XB<sub>n</sub>n and XB<sub>p</sub>p infrared detectors. *Journal of Crystal Growth*.
- KLIPSTEIN, P., LIVNEH, Y., KLIN, O., GROSSMAN, S., SNAPI, N., GLOZMAN, A. et WEISS, E. (2013). A  $k \cdot p$  model of InAs/GaSb type II superlattice infrared detectors. *Infrared Physics & Technology*, 59:53–59.
- KLIPSTEIN, P. C. (2010). Operator ordering and interface-band mixing in the Kane-like Hamiltonian of lattice-matched semiconductor superlattices with abrupt interfaces. *Phys. Rev. B*, 81:235314.
- KREBS, O. et VOISIN, P. (1996). Giant optical anisotropy of semiconductor heterostructures with no common atom and the quantum-confined Pockels effect. *Physical review letters*, 77(9):1829.
- KWOK, S., GRAHN, H., PLOOG, K. et MERLIN, R. (1992). Giant electropleochroism in GaAs-(Al, Ga) As heterostructures : the quantum-well pockels effect. *Physical review letters*, 69(6):973.
- LIVNEH, Y., KLIPSTEIN, P. C., KLIN, O., SNAPI, N., GROSSMAN, S., GLOZMAN, A. et WEISS, E. (2012).  $k \cdot p$  model for the energy dispersions and absorption spectra of InAs/GaSb type-II superlattices. *Phys. Rev. B*, 86:235311.
- LÖWDIN, P.-O. (1950). On the non-orthogonality problem connected with the use of atomic wave functions in the theory of molecules and crystals. *The Journal of Chemical Physics*, 18(3):365–375.

- LUTTINGER, J. (1956). Quantum theory of cyclotron resonance in semiconductors : General theory. *Physical Review*, 102(4):1030.
- LUTTINGER, J. et KOHN, W. (1955). Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields. *Physical Review*, 97(4):869.
- MAGRI, R. et ZUNGER, A. (2002). Effects of interfacial atomic segregation and intermixing on the electronic properties of InAs/GaSb superlattices. *Physical Review B*, 65(16):165302.
- MANURKAR, P., DARVISH, S.-R., NGUYEN, B.-M., RAZEGHI, M. et HUBBS, J. (2010). High performance long wavelength infrared mega-pixel focal plane array based on type-II superlattices. *Applied Physics Letters*, 97(19):3505.
- MARZARI, N., MOSTOFI, A. A., YATES, J. R., SOUZA, I. et VANDERBILT, D. (2012). Maximally localized Wannier functions : Theory and applications. *Reviews of Modern Physics*, 84(4):1419.
- MOHSENI, H., L. V. et RAZEGHI, M. (1998). Interface-induced suppression of the Auger recombinaison in type-II InAs/GaSb superlattices. *Physical Review B*, 58(23):15378.
- NGUYEN, B.-M. (2010). *Theoretical Design and Material Growth of Type-II Antimonide-based Superlattices for Infrared Detection and Imaging*. Thèse de doctorat, NORTH-WESTERN UNIVERSITY.
- NGUYEN, B.-M., HOFFMAN, D., DELAUNAY, P.-Y. et RAZEGHI, M. (2007). Dark current suppression in type II InAs/GaSb superlattice long wavelength infrared photodiodes with M-structure barrier. *Applied Physics Letters*, 91(16):3511.
- PETER, Y. et CARDONA, M. (2010). *Fundamentals of semiconductors : physics and materials properties*. Springer Science & Business Media.
- PHILLIPS, J. C. (1958). Energy-band interpolation scheme based on a pseudopotential. *Physical Review*, 112(3):685.
- PHILLIPS, J. C. et KLEINMAN, L. (1959). New method for calculating wave functions in crystals and molecules. *Physical Review*, 116(2):287.
- PIQUINI, P., ZUNGER, A. et MAGRI, R. (2008). Pseudopotential calculations of band gaps and band edges of short-period (In As)  $n$ /(Ga Sb)  $m$  superlattices with different substrates, layer orientations, and interfacial bonds. *Physical Review B*, 77(11):115314.
- PLIS, E., RODRIGUEZ, J., KIM, H., BISHOP, G., SHARMA, Y., DAWSON, L., KRISHNA, S., LEE, S., JONES, C. et GOPAL, V. (2007). Type II InAs/GaSb strain layer superlattice detectors with p-on-n polarity. *Applied Physics Letters*, 91(13):133512–133512.
- POLLAK, F. H. et CARDONA, M. (1966). Energy band structure of germanium and gallium arsenide : The  $k \cdot p$  method. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 27(2):423–425.

- RAZEGHI, M., ABDOLLAHI POUR, S., HUANG, E., CHEN, G., HADDADI, A. et NGUYEN, B. (2011). Type-II InAs/GaSb photodiodes and focal plane arrays aimed at high operating temperatures. *Opto-Electronics Review*, 19(3):261–269.
- RODRIGUEZ, J., CHRISTOL, P., CERUTTI, L., CHEVRIER, F. et JOULLIE, A. (2005a). MBE growth and characterization of type-II InAs/GaSb superlattices for mid-infrared detection. *Journal of Crystal Growth*, 274(1):6–13.
- RODRIGUEZ, J., CHRISTOL, P., CERUTTI, L., CHEVRIER, F. et JOULLIÉ, A. (2005b). MBE growth and characterization of type-II InAs/GaSb superlattices for mid-infrared detection. *Journal of Crystal Growth*, 274(1):6–13.
- RODRIGUEZ, J., CHRISTOL, P., CHEVRIER, F., NIETO, J. et JOULLIE, A. (2006). A superlattice infrared photodetectors operating at room temperature in the 3–5  $\mu\text{m}$  wavelength domain.
- RODRIGUEZ, J.-B. (2005). *Superréseaux InAs/GaSb réalisés par épitaxie par jets moléculaires pour photodétection à 300 K dans le moyen-infrarouge*. Thèse de doctorat, Université Montpellier 2, IES.
- RODRIGUEZ, J. B., PLIS, E., BISHOP, G., SHARMA, Y., KIM, H., DAWSON, L. et KRISHNA, S. (2007). nBn structure based on InAs/ GaSb type-II strained layer superlattices. *Applied Physics Letters*, 91(4):043514.
- ROGALSKI, A., ANTOSZEWSKI, J. et FARAONE, L. (2009). Third-generation infrared photodetector arrays. *Journal of Applied Physics*, 105(9):091101.
- RUTZ, F., REHM, R., WALTHER, M., KIRSTE, L., MASUR, M., WÖRL, A., SCHMITZ, J., WAURO, M., NIEMASZ, J., SCHEIBNER, R. et ZIEGLER, J. (2011). Current developments for type-II superlattice imaging systems. *Proc. SPIE*, 8012:80120U–80120U–12.
- SAI-HALASZ, G. A., ESAKI, L. et HARRISON, W. A. (1978). InAs-GaSb superlattice energy structure and its semiconductor-semimetal transition. *Phys. Rev. B*, 18:2812–2818.
- SATPATI, B., RODRIGUEZ, J., TRAMPERT, A., TOURNIÉ, E., JOULLIÉ, A. et CHRISTOL, P. (2007). Interface analysis of InAs/GaSb superlattice grown by MBE. *Journal of Crystal Growth*, 301:889–892.
- SLATER, J. C. et KOSTER, G. F. (1954). Simplified LCAO method for the periodic potential problem. *Physical Review*, 94(6):1498.
- SMITH, D. et MAILHIOT, C. (1987). Proposal for strained type II superlattice infrared detectors. *Journal of Applied Physics*, 62(6):2545–2548.
- STEVELER, E., VERDUN, M., PORTIER, B., CHEVALIER, P., DUPUIS, C., BARDOU, N., RODRIGUEZ, J.-B., HAÏDAR, R., PARDO, F. et PELOUARD, J.-L. (2014). Optical index measurement of InAs/GaSb type-II superlattice for mid-infrared photodetection at cryogenic temperatures. *Applied Physics Letters*, 105(14):141103.

- SUCHALKIN, S., BELENKY, G., SVENSSON, S., LAIKHTMAN, B., SMIRNOV, D., TUNG, L. et BANDARA, S. (2011). In-plane and growth direction electron cyclotron effective mass in short period InAs/GaSb semiconductor superlattices. *Journal of Applied Physics*, 110(4):043720.
- SZMULOWICZ, F., ELHAMRI, S., HAUGAN, H. J., BROWN, G. J. et MITCHEL, W. C. (2009). Carrier mobility as a function of carrier density in type-II InAs/GaSb superlattices. *Journal of Applied Physics*, 105(7).
- SZMULOWICZ, F., HAUGAN, H. et BROWN, G. J. (2004). Effect of interfaces and the spin-orbit band on the band gaps of InAs/GaSb superlattices beyond the standard envelope-function approximation. *Phys. Rev. B*, 69:155321.
- TAALAT, R. (2013). *Réalisation et caractérisation électro-optique de photodétecteurs infrarouges à superréseaux InAs/GaSb*. Thèse de doctorat, Université Montpellier 2, IES.
- TIAN, Z.-B., PLIS, E., HINKEY, R. et KRISHNA, S. (2014). Influence of composition in InAs/GaSb type-II superlattices on their optical properties. *Electronics Letters*, 50(23):1733–1734.
- VARSHNI, Y. (1967). Temperature dependence of the energy gap in semiconductors. *Physica*, 34(1):149–154.
- VINTER, B. (2002). Auger recombination in narrow-gap semiconductor superlattices. *Physical Review B*, 66(4):045324.
- VOGL, P., HJALMARSON, H. P. et DOW, J. D. (1983). A Semi-empirical tight-binding theory of the electronic structure of semiconductors. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 44(5):365–378.
- VOISIN, P., BLEUSE, J., BOUCHE, C., GAILLARD, S., ALIBERT, C. et REGRENY, A. (1988). Observation of the Wannier-Stark quantization in a semiconductor superlattice. *Physical review letters*, 61(14):1639.
- VURGAFTMAN, I., MEYER, J. et RAM-MOHAN, L. (2001). Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys. *Journal of applied physics*, 89(11):5815–5875.
- WALTHER, M., SCHMITZ, J., REHM, R., KOPTA, S., FUCHS, F., FLEISSNER, J., CABANSKI, W. et ZIEGLER, J. (2005). Growth of InAs/GaSb short-period superlattices for high-resolution mid-wavelength infrared focal plane array detectors. *Journal of Crystal growth*, 278(1):156–161.
- WEI, Y., GIN, A., RAZEGHI, M. et BROWN, G. J. (2002a). Type II InAs/GaSb superlattice photovoltaic detectors with cutoff wavelength approaching 32  $\mu\text{m}$ . *Applied Physics Letters*, 81(19):3675–3677.
- WEI, Y., HOOD, A., YAU, H., GIN, A., RAZEGHI, M., TIDROW, M. Z. et NATHAN, V. (2005). Uncooled operation of type-II InAs/GaSb superlattice photodiodes in the midwavelength infrared range. *Applied Physics Letters*, 86(23):3106.

- WEI, Y. et RAZEGHI, M. (2004). Modeling of type-II InAs/GaSb superlattices using an empirical tight-binding method and interface engineering. *Physical Review B*, 69(8):085316.
- WEI, Y., RAZEGHI, M. et BROWN, G. J. (2002b). Advanced InAs/GaSb superlattice photovoltaic detectors for very long wavelength infrared applications. *Applied Physics Letters*, 80(18):3262–3264.
- WOOD, D. et ZUNGER, A. (1996). Successes and failures of the kp method : A direct assesment for GaAs/AlAs quantum structures. *Physical Review B*, 53(12):7949.
- YOUNGDALE, E., MEYER, J., HOFFMAN, C., BARTOLI, F., GREIN, C., YOUNG, P., EHRENREICH, H., MILES, R. et CHOW, D. (1994). Auger lifetime enhancement in InAs/Ga<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>Sb superlattices. *Applied Physics Letters*, 64(23):3160–3162.







## **Modélisation des propriétés opto-électroniques des superréseaux de type III InAs/GaSb**

Le superréseau (SR) InAs/GaSb est une structure prometteuse pour répondre aux enjeux de la détection infrarouge de 3<sup>ème</sup> génération. Cependant, les réalisations actuelles n'atteignent pas les performances attendues. Il existe donc un besoin en modélisation pour mieux comprendre les limites physiques des photodétecteurs SR InAs/GaSb. Dans ce travail de thèse, réalisé en collaboration entre le 3-5 Lab, l'Onera et l'IES, un outil de modélisation a été adapté aux SR InAs/GaSb afin d'améliorer la compréhension de ces détecteurs dans le domaine spectral du MWIR (3-5 $\mu$ m) et d'orienter les futures réalisations dans le domaine du LWIR (8-14  $\mu$ m). Pour ce faire, un code kp 18 bandes a, dans un premier temps, été adapté à la modélisation de cette hétérojonction de type III. Les résultats de modélisation ont ensuite été confrontés à des mesures expérimentales (énergie de bande interdite et coefficient d'absorption) afin de déterminer certains paramètres matériaux mal connus en entrée de notre modèle. Les résultats obtenus aujourd'hui grâce à notre outil sont en bon accord avec les mesures optiques à 80K. Dans un second temps, ce modèle nous a permis de calculer certains paramètres intrinsèques de structures SR InAs/GaSb, présentant différents types de période, et sensibles du MWIR au LWIR. La modélisation des masses effectives a notamment permis de mettre en évidence l'origine des faibles rendements quantiques mesurés sur des détecteurs SR InAs-rich (plus d'InAs que de GaSb dans la période). Enfin, nous avons proposé deux nouvelles structures SR pour la détection dans le LWIR. Ces structures seront prochainement réalisées à l'IES.

**Mots-clés :** SUPER-RÉSEAU ; INAS/GASB ; MODELISATION PHYSIQUE ; ÉLECTRO-OPTIQUE ; MOYEN INFRAROUGE ; LOINTAIN INFRAROUGE

## **Modelling of optoelectronic properties of type-II InAs/GaSb superlattices**

InAs/GaSb superlattice (SL) is a promising structure to meet the challenges of the third generation infrared detection. However, current achievements do not reach expected performance. There is therefore a need for modelling in order to better understand the physical limitations of InAs/GaSb SL photodetectors. In this thesis work, performed in collaboration between 3-5 Lab, Onera and IES, a modelling tool has been adapted to InAs/GaSb SL to improve our understanding of these detectors in the MWIR spectral domain (3-5 $\mu$ m) and guide future achievements in the LWIR (8-14 $\mu$ m). First, a 18-band kp model was adapted to the modelling of this type-II heterojunction. The modelling results were then compared with experimental measurements (bandgap energy and absorption coefficient) to determine some badly known material input parameters of our model. The current modelling results are in good agreement with optical measurements at 80K. Secondly, this model enabled us to calculate some intrinsic parameters of InAs/GaSb SL structures, with different types of period, and sensitive in the MWIR and LWIR spectral band. Modelling of effective masses allowed us to identify the origin of low quantum efficiencies measured on InAs-rich SL detectors (more InAs than GaSb in the period). Finally, we proposed two new SL structures for LWIR detection. These structures will soon be manufactured at IES.

**Keywords :** SUPERLATTICE ; InAs/GaSb ; PHYSICAL MODELLING ; ELECTRO-OPTICS ; MIDWAVE INFRARED ; LONGWAVE INFRARED